

## Modélisation moléculaire d'une nouvelle protéine allergène de l'arachide : l'ABC transporteur 1

Djeffal Zeyneb<sup>1\*</sup>, Talbi-khemili Souad<sup>2</sup>, Boutebba Aissa<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Département de Biochimie, Faculté des sciences, Université Badji Mokhtar, Annaba

<sup>2</sup>Département de Biologie, Faculté des sciences, Université M'Hamed Bougera, Boumerdès

<sup>3</sup>Département de Biochimie, Faculté des sciences, Université Badji Mokhtar, Annaba

Code CCO 2

E-mail\* : [zeynebnardine@gmail.com](mailto:zeynebnardine@gmail.com)

### Introduction & Objectifs :

L'allergie à l'arachide est un véritable problème de santé publique dans certains pays en raison de sa fréquence, de la sévérité des manifestations cliniques et de sa persistance. Les allergènes en cause sont principalement des protéines. Parmi les protéines allergènes, l'ABC transporteur 1 est identifiée comme un nouvel allergène. Pour prédire les épitopes linéaires, la structure tridimensionnelle cruciale pour l'évaluation d'une réactivité IgE potentielle et les épitopes conformationnels de l'ABC transporteur 1, une analyse in silico est réalisée.

### Méthodologie (Matériel et méthodes):

Pour la détermination des épitopes linéaires, la séquence protéique est soumise aux serveurs web, Abcpred et Bcpred. La structure tridimensionnelle est prédite à l'aide du programme LOMETS par la méthode de modélisation par reconnaissance de plis. Aux modèles 3D générés, une minimisation de la fonction d'énergie est réalisée par GROMACS et le score ANOLEA est calculé. La qualité des cinq modèles de protéines est évaluée à l'aide de divers programmes et serveurs d'analyse de fonction de notation tel que ; Procheck, Verify 3D, ERRAT et QMEAN. Le meilleur modèle sélectionné est utilisé pour la prédiction des épitopes conformationnels par le serveur Disco Tope.

### Résultats et Discussion :

Les résultats montrent des épitopes linéaires dans les positions suivantes : 128AAPILRTRRSVIVSA, 297EVVNMKTDLNRNVNE, 347DALQDVAKAV NGLLTP, 398NSLAKLLEKEGYKAIS. Le meilleur modèle tridimensionnel prédit est sélectionné sur la base du nombre des résidus dans les régions autorisées, généreusement autorisées, et non autorisées selon le diagramme de Ramachandran donné par Procheck. Les probabilités des résidus dans les régions les plus favorisées sont élevées 91.6% et selon un Z-score moyen énergétique négatif -0.1242901. Au cours du repliement de la protéine allergène, les 58 résidus d'acides aminés déterminés sur les 338 résidus (nombre total de résidus) interagissent pour former les épitopes conformationnels.

### Conclusion :

On en déduit que les anticorps reconnaissent les épitopes même après la dénaturation des protéines, ce qui explique le pouvoir allergène même après la cuisson et la digestion gastrique. Les structures tertiaires déterminées permettent l'identification des épitopes conformationnels car la conservation de la structure spatiale tridimensionnelle est cruciale pour l'évaluation d'une réactivité IgE potentielle.

**Mots clés :** Arachide, Allergie, Protéine allergène, Epitopes linéaires, Structure tridimensionnelle Epitopes conformationnels.

### Références bibliographiques

- F Hama-Ba, et al, (Nov2017), African Journal of Food, Agriculture, Nutrition and Development 17(04):12871-12888
- Bouakkadia, H et al, (December 2015), Ann Biol Clin 2015; 73 (6): 690-704
- Traidl-Hoffmann C et al, (2009), J Allergy Clin Immunol 2009; 123: 558-66

