

O reconhecimento de alvos virais pelo sistema imune ocorre através da interação entre os receptores dos linfócitos T e os complexos MHC:peptídeo na superfície das células infectadas. A análise da região de contato destes complexos pode evidenciar características compartilhadas entre peptídeos derivados de patógenos, sendo que o estudo destes padrões tem potencial aplicação no desenvolvimento de vacinas antivirais. Para acessar esse tipo de informação e poder entender o comportamento dos alelos de MHC durante a apresentação de peptídeos virais, é indispensável o conhecimento da estrutura dos complexos gerados. Entretanto, a disponibilidade de estruturas tridimensionais é muito reduzida comparada aos possíveis epitopos virais ancorados a diferentes alelos de MHC existentes. Desse modo, a reconstrução de complexos que não possuem estrutura cristalografada torna-se um objetivo atraente. Nesse âmbito, nós pretendemos reproduzir a estrutura tridimensional da cadeia alfa (que contém a fenda peptídica) de dois alelos de MHC murinos (H2-D^b e H2-K^b) utilizando somente a sequência primária de aminoácidos. Estes alelos possuem estruturas depositadas no *Protein Data Bank* (PDB) e servirão como controle do processo. A modelagem por homologia e otimização dos modelos será realizada com o software Modeller, sendo que os moldes utilizados serão de estruturas não relacionadas para garantir a acurácia do processo. Os modelos serão avaliados através da análise do gráfico de Ramachandran e de outros softwares de validação (Verify3D, ERRAT, entre outros). Até o momento, a pesquisa focou-se no aprendizado e na implementação das técnicas de modelagem de proteínas, inclusive desenvolvendo material didático sobre o tema. A reprodução de bons modelos para estruturas já cristalografadas nos fornecerá a base para reconstruir estruturas desconhecidas de diversas moléculas de MHC.