

An algorithm for the development of a recombinant antiherpetic subunit vaccine combining the crystal structure analysis, AlphaFold2-based modeling, and immunoinformatics.

Tatiana V. Rakitina^{1,2*}, Evgeniya V. Smirnova², David D. Podshivalov^{1,3,4}, Vladimir I. Timofeev^{1,3}, Aleksandr S. Komolov¹, Anna V. Vlaskina¹, Tatiana N. Gaeva¹, Raif G. Vasilov¹, Yulia A. Dyakova¹, and Mikhail V. Kovalchuk¹

Supplementary Materials

Table S1. T-cell epitopes.

ID	Sequence	aff	aff_rescale	cle	tap	COMB
456	LSNTLAELY	0.7225	3.0676	0.6037	2.9230	3.3043
387	SSDAISTTF	0.5513	2.3407	0.9717	2.3470	2.6038
802	QSNPMKALY	0.5483	2.3278	0.7832	2.9320	2.5919
306	GSHTETSYS	0.4419	1.8764	0.9758	2.6490	2.1552
641	FTFGGGYVY	0.3386	1.4376	0.9636	2.8680	1.7255
789	AAAFFAFRY	0.3069	1.3032	0.9702	3.1860	1.6080
142	YTEGIAVVF	0.2924	1.2414	0.8376	2.4900	1.4915
724	HADANAAMF	0.3038	1.2901	0.4188	2.3290	1.4693
288	VLATGDFVY	0.2715	1.1529	0.9467	2.9180	1.4408
311	HTSYAADRF	0.2865	1.2164	0.1658	2.2510	1.3538
589	ISSRPGACY	0.2163	0.9182	0.9620	3.1160	1.2183
694	IKDSGLLDY	0.2141	0.9091	0.9480	2.6540	1.1840
205	GVCIRSTAKY	0.1542	0.6547	0.9493	2.9940	0.9468
134	PTRPEGQNY	0.1783	0.7571	0.3715	2.4650	0.9360
670	FIDLNITML	0.1643	0.6977	0.9533	0.8220	0.8818
647	YVYFEEYAY	0.1234	0.5240	0.9535	3.2000	0.8270
171	SQVWFGHRY	0.1201	0.5099	0.9359	3.1780	0.8092
767	VSSFMSNPF	0.1460	0.6198	0.3750	2.6030	0.8062
157	YKFKATMY	0.1179	0.5006	0.9685	2.9210	0.7919
872	LSAKVTDMV	0.1611	0.6839	0.5186	0.4240	0.7829

Table S2. Linear B-cell epitopes.

N	C H A I N	S T A R T	E N D	SEQUENCE	L E N G T H	S C O R E
1	A	713	865	DLRFADIDTVIHAVMGIVGGVVSASVSGVSSFFGALAVGLLVLAGLAAFFAFRYVMR LQSNPMKALYPLTTKELEEGGDFDEAKLAEAREMIRYMALVSAMERTEHKAKK	110	0.837
2	A	555	669	VGRRVSARMLGDVMAVSTCVPAADNVIVQNSMRISSRPGACYSRPLVSFRYEDQGP LVEGQLGENNELRLTRDAIEPCTVGHRRYFTFGGGYVYFEEYAYSHQLSRADITTVST	115	0.772
3	A	104	130	IKAENTDANFYVCPPTGATVVQFEQP	27	0.698
4	A	453	492	QPLLSNTLAELYVREHLREQSRKPSV	26	0.681
5	A	422	439	DRIFARRYNATHIKVGQP	18	0.63
6	A	174	180	WFGHRY	7	0.62
7	A	321	341	QVDGFYARDLTTKARATAPTT	21	0.613
8	A	301	309	YGYREGSHT	9	0.548
9	A	257	262	SRVEAF	6	0.537
10	A	198	205	IDKINAKG	8	0.53

Table S3. Conformational B-cell epitopes.

No.	Sequence	Length (residues)	Score
1	A:F835, A:D836, A:E837, A:A838, A:K839, A:L840, A:A841, A:E842, A:A843, A:R844, A:E845, A:M846, A:I847, A:R848, A:Y849, A:M850, A:A851, A:L852, A:V853, A:S854, A:A855, A:M856, A:E857, A:R858, A:T859, A:E860, A:H861, A:K862, A:A863, A:K864	30	0.971
2	A:E831, A:G832, A:G833, A:D834	4	0.941
3	A:V753, A:M754, A:G755, A:I756, A:V757, A:G758, A:G759, A:V760, A:V761, A:S762, A:A763, A:V764, A:S765, A:G766, A:V767, A:S768, A:S769, A:F770	18	0.852
4	A:G776, A:A777, A:L778, A:A779, A:V780, A:G781, A:L782, A:L783, A:V784, A:L785, A:A786, A:G787, A:L788, A:A789, A:A790, A:A791, A:F792, A:F793, A:A794, A:F795, A:R796, A:Y797, A:V798, A:M799, A:R800, A:L801, A:Q802, A:S803, A:N804, A:P805, A:M806, A:K807, A:A808, A:L809, A:Y810, A:P811, A:L812, A:T813, A:T814, A:K815	40	0.762
5	A:I104, A:K105, A:A106, A:E107, A:N108, A:T109, A:D110, A:A111, A:N112, A:F113, A:Y114, A:V115, A:C116, A:P117, A:P118, A:P119, A:T120, A:G121, A:A122, A:T123, A:V124, A:V125, A:Q126, A:F127, A:E541, A:R543, A:K544, A:L545, A:N546, A:P547, A:N548, A:A551, A:S552, A:V555, A:G556, A:R557, A:R558, A:V559, A:S560, A:A561, A:R562, A:M563, A:L564, A:G565, A:D566, A:V567, A:M568, A:A569, A:V570, A:S571, A:T572, A:C573, A:V574, A:P575, A:V576, A:A577, A:A578, A:D579, A:N580, A:V581, A:I582, A:V583, A:Q584, A:N585, A:S586, A:M587, A:R588, A:I589, A:S590, A:S591, A:R592, A:P593, A:G594, A:A595, A:C596, A:Y597, A:S598, A:R599, A:P600, A:L601, A:V602, A:S603, A:F604, A:R605, A:Y606, A:E607, A:D608, A:Q609, A:G610, A:P611, A:L612, A:V613, A:E614, A:G615, A:Q616, A:L617, A:G618, A:E619, A:N620, A:N621, A:E622, A:L623, A:R624, A:L625, A:T626, A:R627, A:D628, A:A629, A:I630, A:E631, A:P632, A:C633, A:T634, A:V635, A:G636, A:H637, A:R638, A:R639, A:Y640, A:F641, A:T642, A:F643, A:G644, A:G645, A:G646, A:Y647, A:V648, A:Y649, A:F650, A:E651, A:E652, A:Y653, A:A654, A:Y655, A:S656, A:H657, A:Q658, A:L659, A:S660, A:R661, A:A662, A:D663, A:I664, A:T665, A:T666, A:V667, A:S668, A:T669, A:F670	149	0.746
6	A:D713, A:L714, A:A717, A:D718, A:I719, A:D720, A:T721, A:V722, A:I723, A:H724, A:A725	11	0.713
7	A:L399, A:F425, A:A426, A:R427, A:R428, A:Y429, A:N430, A:A431, A:T432, A:H433, A:I434, A:K435, A:V436, A:G437, A:Q438, A:P439, A:Q453, A:P454, A:L455, A:L456, A:S457, A:N458, A:T459, A:L460, A:A461, A:E462, A:L463, A:Y464, A:V465, A:R466, A:E467, A:H468, A:L469, A:R470, A:E471, A:Q472, A:S473, A:R474	38	0.674
8	A:W174, A:F175, A:G176, A:H177, A:R178, A:Y179, A:S180, A:R258, A:V259, A:E260, A:A261, A:F262	12	0.59
9	A:I198, A:D199, A:K200, A:I201, A:N202, A:A203, A:K204, A:G205, A:E233, A:L234, A:K235, A:Y301, A:G302, A:Y303, A:R304, A:E305, A:G306, A:S307, A:H308, A:T309, A:Q321, A:V322, A:D323, A:G324, A:F325, A:Y326, A:A327, A:R328, A:D329, A:L330, A:T331, A:T332, A:K333, A:A334, A:R335, A:A336, A:T337, A:A338, A:P339, A:T340, A:T341, A:W356	42	0.571
10	A:T400, A:E401, A:K475, A:P476	4	0.57
11	A:D419, A:D422, A:R423	3	0.549

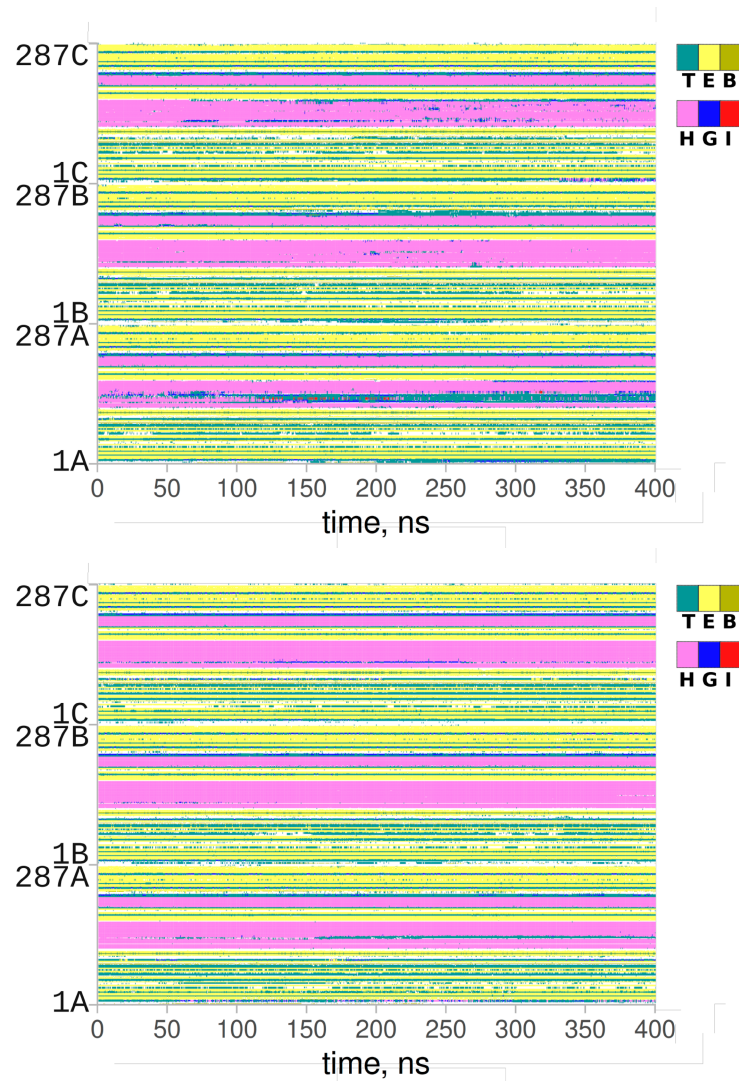


Figure S1. Time-evolution of the secondary structure throughout the MD trajectory in all monomers of the subIHA trimer. The results of two independent experiments performed using the Amber-18 simulation package with the ff99SB-ildn and ff19SB force fields are shown in the top and bottom panels, respectively. Secondary structure elements were assigned according to VMD (Humphrey, Dalke, & Schulten, 1996). The elements of secondary structures are colored according to the legend: a-helix, H; 3-10-helix, G; extended conformation (β), E; turn, T; isolated bridge, B; coil (none of the above), uncolored.