

ÁREA TEMÁTICA: Virología estructural.

<https://dx.doi.org/10.14482/sun.01.102.718>

ACV-2025-029

Análisis *in sílico* de la interacción entre propileno y proteínas clave en el ciclo de replicación VIH mediante acoplamiento y dinámica molecular

HERNANDO ALIRIO PALACIO MOSQUERA¹, MARIANA GONZÁLEZ IDÁRRAGA¹,
VALERIA HERNÁNDEZ HERRERA¹, JUAN JOSÉ MANTILLA SOLARTE¹,
SANTIAGO RENDON-MARIN², DIANA MARYORY GÓMEZ-GALLEGÓ³

¹ Universidad de Antioquia, Escuela de Microbiología, Medellín (Colombia).

² Corporación Universitaria Remington, Medellín (Colombia).

³ Universidad Cooperativa de Colombia, Medellín (Colombia).

Correspondencia: Hernando Alirio Palacio Mosquera. hernando.palacio1@udea.edu.co

RESUMEN

Introducción: Los microplásticos son contaminantes emergentes con creciente evidencia sobre su capacidad de interactuar con biomoléculas, incluyendo proteínas virales. Se ha demostrado que pueden actuar como vehículos para virus, favoreciendo su estabilidad y capacidad de contacto con células huésped. Aunque se ha explorado esta interacción en otro virus, su posible efecto sobre el VIH aún no ha sido evaluado. En este contexto, este trabajo tuvo como objetivo analizar, mediante acoplamiento y dinámica molecular, la interacción entre propileno –modelo del polipropileno– y proteínas clave del VIH, identificando afinidades diferenciales y potenciales implicaciones funcionales.

Metodología: Se seleccionaron las proteínas virales gp120, gp41, proteasa e integrasa, cuyas estructuras tridimensionales fueron obtenidas del Protein Data Bank y validadas con ProSA-web y Swiss-Model. Los sitios potenciales de interacción se determinaron mediante Peptimap, y se realizaron simulaciones de acoplamiento con HADDOCK, SwissDock y Autodock Vina. La estabilidad estructural se evaluó mediante análisis de RMSD.

Resultados: gp41 presentó el mejor HADDOCK score (-10.1), aunque con el clúster size más pequeño (153), lo cual indica alta afinidad pero menor estabilidad. La proteasa obtuvo un score de -8.8 y el mayor clúster size (190), lo que sugiere una interacción estable y sostenida. La integrasa registró un score de -9.3 con clúster size de 173, y gp120 mostró un score de -8.7 con clúster size de 179. En SwissDock, gp120 presentó las energías de unión más bajas (-2.754 y -2.757 kcal/mol), aunque con interacciones inestables según RMSD.

Conclusiones: Este estudio *in silico* sugiere que el propileno mostró afinidad diferencial con proteínas clave del VIH-1, destacando posibles puntos de unión en sitios funcionales. La interacción con gp41 podría interferir en la fusión viral, mientras que la unión estable con la proteasa sugiere un posible impacto sobre la maduración del virión. Este estudio plantea una posible influencia de los microplásticos en la replicación del VIH, con implicaciones para la virología ambiental.

Palabras clave: microplásticos, VIH, acoplamiento molecular, replicación viral, proteínas.