

ÁREA TEMÁTICA: Virología estructural.

<https://dx.doi.org/10.14482/sun.01.303.862>

ACV-2025-053

## Evaluación *in silico* del potencial impacto de microplásticos sobre la replicación viral y la eficacia terapéutica en el VIH-1

DIANA MARYORY GÓMEZ-GALLEGO<sup>1</sup>, SANTIAGO RENDON-MARIN<sup>2</sup>, MANUEL OSPINA-MEJÍA<sup>3</sup>, NATALIA TABORDA<sup>2</sup>, JUAN C. HERNÁNDEZ<sup>1</sup>

1 Grupo Infettare, Facultad de Medicina, Universidad Cooperativa de Colombia, Medellín (Colombia).

2 Grupo de Investigaciones Biomédicas Uniremington, Facultad de Ciencias de la Salud, Programa de Medicina, Corporación Universitaria Remington, Medellín (Colombia).

3 Universidad Pontificia Bolivariana, Medellín (Colombia).

**Correspondencia:** Diana Maryory Gómez-Gallego. [diana.gomezga@campusucc.edu.co](mailto:diana.gomezga@campusucc.edu.co)

## RESUMEN

**Introducción:** Los microplásticos (MP) son contaminantes ambientales detectados en tejidos y fluidos humanos. Se ha demostrado que actúan como vehículos para virus, aumentando su estabilidad y capacidad de interacción con células huésped. Sin embargo, su posible rol en la infección por VIH-1 no ha sido explorado. El VIH continúa siendo un problema prioritario de salud pública global, cuyo tratamiento depende de antirretrovirales que inhiben proteínas virales clave. En este contexto, los MP podrían interactuar con estas proteínas, afectando tanto la replicación viral como la eficacia terapéutica. Este estudio propone un análisis *in silico* para evaluar esta hipótesis.

**Métodos:** Se seleccionaron tres proteínas del VIH-1: gp120, integrasa y proteasa. Las estructuras tridimensionales de gp120 e integrasa fueron modeladas con AlphaFold, mientras que la proteasa se obtuvo del Protein Data Bank. Todas fueron validadas mediante ProSA-web y SwissModel, y se definieron sitios de interacción con PeptiMap. Se emplearon como ligandos el estireno y tereftalato de polietileno (PET), y antirretrovirales específicos como control positivo: Fostemsavir, Dolutegravir y Ritonavir. Se realizó análisis de acoplamiento molecular con HADDOCK y SwissDock para evaluar la interacción de proteínas y ligandos, y simulaciones de dinámica molecular para determinar la estabilidad en el tiempo.

**Resultados:** Los antirretrovirales mostraron las mayores afinidades (HADDOCK score: -48 a -55; SwissDock:  $\Delta G$  hasta -7.6 kcal/mol). El PET exhibió afinidades moderadas hacia las tres proteínas (-6.4 a -5.5 kcal/mol), compartiendo sitios de unión con los fármacos. El estireno mostró afinidades menores y menos consistentes.

**Conclusiones:** Este estudio sugiere que ciertos MP, especialmente PET, podrían actuar como interferentes estructurales o competidores pasivos, afectando, por un lado, la interacción fármaco-proteína y, por otro, estableciendo contactos directos con proteínas virales que podrían influir en la replicación del VIH-1. Estos hallazgos abren nuevas preguntas sobre el impacto ambiental en la progresión y tratamiento de la infección por VIH.

**Palabras clave:** VIH-1, acoplamiento molecular, dinámica molecular, microplásticos, replicación viral, antirretrovirales.