



ÁREA TEMÁTICA: Virología estructural.

<https://dx.doi.org/10.14482/sun.01.303.864>

ACV-2025-055

## Evaluación *in silico* de la interacción de sulfasalazina con proteínas del VIH-1 y componentes del inflamasoma

MANUEL OSPINA-MEJÍA<sup>1,2,3</sup>, SANTIAGO RENDÓN-MARÍN<sup>2</sup>, JUAN C. HERNÁNDEZ<sup>3</sup>, NATALIA A. TABORDA<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Universidad Pontificia Bolivariana (UPB), Medellín (Colombia).

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

<sup>3</sup> Grupo de investigación Infettare, Universidad Cooperativa de Colombia, Medellín (Colombia). 5 Grupo Inmunovirología, Universidad de Antioquia, Medellín (Colombia).

**Correspondencia:** Natalia A. Taborda. natalia.taborda@uniremington.edu.co

## RESUMEN

**Introducción:** La infección por el VIH-1 continúa siendo un desafío global. Este virus induce una inflamación crónica multisistémica, que se establece desde el inicio de la infección y persistente durante la fase crónica. A pesar de que la terapia antirretroviral es altamente efectiva en el control de la replicación viral, la activación inmune persiste, generando patologías de carácter inflamatorio, por lo que se hace necesario evaluar terapias immunomoduladoras con potencial uso como complemento de la terapia antirretroviral. Por lo tanto, el objetivo de este estudio fue determinar potenciales interacciones moleculares *in silico* entre la sulfasalazina (SSZ) y moléculas relacionadas con la infección por VIH-1.

**Métodos:** Se seleccionaron estructuras cristalográficas de alta resolución (<2Å) del Protein Data Bank. Los potenciales sitios de interacción se determinaron con Peptimap y las energías de unión mediante AutoDock-Vina, Expasy-Swiss y HADDOCK2.4. Se empleó la SSZ y blancos proteicos, incluyendo: factores antivirales ( $\alpha$ -defensinas,  $\beta$ -defensina-2, APOBEC3G y TRIM- $\alpha$ ); citoquinas proinflamatorias (IL-1 $\beta$ , IL-6, IL-8, IL-15, IL-18 y TNF- $\alpha$ ); inflamasomas (NLRC4, NLRP3 y AIM2) y proteínas virales (gp120, gp41, integrasa y proteasa). Finalmente, se realizaron simulaciones de dinámica molecular con GROMACS para observar la estabilidad en el tiempo.

**Resultados:** Se encontró una afinidad homogénea en los tres softwares de acoplamiento para APOBEC3G con valores de -8 kcal/mol en AutoDock Vina, -7,91 kcal/mol en Expasy-Swiss y -60,7 HADDOCK score. Los demás blancos mostraron resultados heterogéneos con las herramientas computacionales empleadas. Respecto a la dinámica molecular, las moléculas con menor variación en el RMSD fueron la IL-6, IL-15 y la proteína viral gp41, con variaciones de máximo 0,5 nm en 50 ns.

**Conclusiones:** Los resultados de acoplamiento mostraron alta concordancia para APOBEC3G, lo cual sugiere una afinidad robusta. La estabilidad observada para IL-6, IL-15 y gp41 mediante dinámica molecular sugiere interacciones estables. Estos hallazgos destacan a APOBEC3G, IL-6, IL-15 y gp41 como candidatos prometedores para estudios posteriores *in vitro*.

**Palabras clave:** inflamación, VIH, antirretrovirales, inmunología.