



ÁREA TEMÁTICA: Virología estructural.

<https://dx.doi.org/10.14482/sun.01.303.868>

ACV-2025-062

Interacción entre las proteínas conservadas VP37, VP39 y 8ORV en *monkeypox virus* y el compuesto antiviral NIOCH-14: aproximación *in silico*

LORENA PÉREZ LONDOÑO¹, CRISTIAN HENAO MORALES¹,
DEYSI TATIANA OSPINA MUÑOZ¹, DIANA MARYORY GÓMEZ GALLEG²,
SANTIAGO RENDON-MARIN³

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

² Grupo Infettare, Facultad de Medicina, Universidad Cooperativa de Colombia, Medellín (Colombia). Escuela de Microbiología, Universidad de Antioquia, Medellín (Colombia).

³ Grupo de Investigaciones Biomédicas Uniremington, Facultad de Ciencias de la Salud, Programa de Medicina, Corporación Universitaria Remington, Medellín (Colombia).

Correspondencia: Lorena Pérez Londoño. lorena.perezl@udea.edu.co

RESUMEN

Introducción: La viruela del simio, causada por *monkeypox virus* (MPXV), ha emergido recientemente como una amenaza global de salud pública, que no cuenta con un tratamiento antiviral específico aprobado. Las proteínas VP37, VP39 Y 8ORV, son fundamentales en el ciclo viral de MPXV y son altamente conservadas, lo que las convierte en potenciales blancos terapéuticos. El antiviral NIOCH-14 ha mostrado actividad contra *Orthopoxvirus*, actuando sobre la proteína VP37, sin embargo, su interacción con proteínas clave en MPXV aún no ha sido completamente explorada. El objetivo de este estudio fue evaluar la interacción molecular del antiviral NIOCH-14 con las proteínas virales clave de MPXV (8ORV, VP37, VP39) mediante análisis *in silico*.

Métodos: Las estructuras de las proteínas VP39 y 8ORV se obtuvieron del PDB, mientras que VP37 y EVM036 fueron modeladas por homología usando Swiss-Model y validadas estereoquímicamente con MolProbity. El ligando NIOCH-14 se descargó de PubChem. Se realizó acoplamiento molecular con AutoDock Vina y Haddock 2.4, se analizaron energías de unión e interacciones no covalentes.

Resultados: Aunque NIOCH-14 es un análogo del compuesto ST-246 (Tecovirimat), dirigido principalmente a la proteína VP37, el análisis con AutoDock Vina mostró una mayor afinidad de unión con la proteína VP39, clave para la replicación viral. Sin embargo, el análisis con Haddock reveló una mayor afinidad de unión con 8ORV, una poxina reguladora de la respuesta inmune innata de la célula hospedera.

Conclusiones: Este estudio sugiere que NIOCH14 podría ser un tratamiento antiviral prometedor contra MPXV al mostrar interacciones favorables con proteínas virales clave, diferentes a VP37. Las divergencias entre los softwares empleados destacan la importancia de la parametrización. Es necesaria la realización de dinámica molecular para analizar el comportamiento y estabilidad en el tiempo de los complejos a condiciones fisiológicas.

Palabras clave: *monkeypox virus*, NIOCH-14, proteínas conservadas virales, docking molecular, potencial terapéutico.