



SIMILITUD CUÁNTICA MOLECULAR, REACTIVIDAD QUÍMICA Y CRIBADO DE BASES DE DATOS DE FARMACÓFOROS 3D DE LAS PROTEÍNAS QUINASAS A, B Y G DE *Mycobacterium tuberculosis*

Morales Bayuelo, Alejandro^{1*}

¹Grupo Genoma, Escuela de Medicina, Universidad del Sinú, Seccional Cartagena, Colombia.

* amorales@unisinucartagena.edu.co

RESUMEN

Mycobacterium tuberculosis sigue siendo uno de los patógenos más devastadores del mundo. Por esta razón, desarrollamos un estudio que incluyó la búsqueda de farmacóforos en 3D, el análisis de selectividad y el cribado en bases de datos de una serie de compuestos antituberculosos asociados con las proteínas quinasas A, B y G. Se espera que este estudio teórico arroje luz sobre aspectos moleculares que podrían contribuir al conocimiento de la mecánica molecular que subyace a las interacciones de estos compuestos con la actividad antituberculosa.

Utilizando el campo de Similitud Cuántica Molecular y los descriptores de reactividad, basados en la Teoría del Funcional de la Densidad, fue posible medir la cuantificación de los efectos estéricos y electrostáticos mediante las escalas de superposición y convergencia cuantitativa de Coulomb (alfa y beta). Además, se desarrolló un análisis de los índices de reactividad utilizando descriptores globales y locales, identificando los sitios de unión y la selectividad de estos compuestos antituberculosos en los sitios activos.

Finalmente, los farmacóforos reportados para PKn A, B y G se utilizaron para realizar un análisis de bases de datos, utilizando una base de datos con fármacos antituberculosos del grupo de investigación de Kelly Chibale (<http://www.kellychibaleresearch.uct.ac.za/>), para encontrar compuestos con afinidad por las dianas proteicas específicas asociadas con PKn A, B y G. En este sentido, esta metodología híbrida (mecánica molecular/química cuántica) ofrece nuevos conocimientos sobre el diseño de fármacos que podrían ser útiles en el tratamiento de la tuberculosis en la actualidad.

Palabras claves: *Mycobacterium tuberculosis*, farmacóforos, proteínas quinasas, antituberculosos.

