

UNIVERSIDAD NACIONAL DE SAN ANTONIO ABAD DEL CUSCO

FACULTAD DE CIENCIAS DE LA SALUD

ESCUELA PROFESIONAL DE FARMACIA Y BIOQUÍMICA



ACTIVIDAD ANTIBACTERIANA DEL PARTENÓLIDO FRENTE A CEPAS  
DE *Staphylococcus aureus* ATCC® 29213 Y APROXIMACIÓN AL  
MECANISMO DE INTERACCIÓN MEDIANTE MÉTODOS  
QUIMIOINFORMÁTICOS

TESIS PARA OPTAR AL TÍTULO  
PROFESIONAL DE QUÍMICO FARMACÉUTICO

**PRESENTADO POR:**

Bach. WILMAR PUMA ZAMORA

**ASESORA:**

Mgt. TATIANA DEL CASTILLO DE LOAYZA

**CO-ASESORES:**

Ph.D. IHOSVANY CAMPS RODRÍGUEZ

Mgt. CARLOS ALBERTO SERRANO FLORES

CUSCO - PERÚ

2019

## RESUMEN

Este trabajo de investigación tuvo por finalidad demostrar la actividad antibacteriana del partenólido frente a *Staphylococcus aureus* ATCC® 29213; y realizar una aproximación teórica al mecanismo de interacción entre el partenólido y tres dianas farmacológicas de *Staphylococcus aureus*, usando acoplamiento molecular y DFT.

El ensayo de concentración inhibitoria mínima, se realizó por dilución en caldo con lectura espectrofotométrica a 600 nm, obteniéndose un valor final de 129.701 µg/ml. Asimismo, el ensayo de concentración bactericida mínima se hizo mediante la técnica de sembrado en agar, obteniéndose un valor final de 984.932 µg/ml, y el ensayo de concentración inhibitoria mínima mediante difusión en agar, obtuvo un halo de inhibición máximo de 18.72 mm para una concentración de partenólido de 128µg/25µL.

Las energías libres de unión obtenidos con acoplamiento molecular por ajuste inducido, determinaron que el partenólido tiene una baja afinidad por el sitio activo de la DHFR (-8.349 kcal/mol); mientras que en el sitio activo del dominio ATPasa de la DNA-GyrB (-6.423 kcal/mol), y los sitios activos del dominio transpeptidasa (-6.754 kcal/mol) y transglicosilasa (-5.238 kcal/mol) de la PBP2, el partenólido tendría una afinidad poco considerable.

Las formas de interacción entre el partenólido y los sitios activos de las enzimas de estudio; se dieron principalmente por puentes de hidrógeno e interacciones de Van Der Waals en los sitios activos de los dominios ATPasa de la DNA-GyrB y, transpeptidasa y transglicosilasa de la PBP2; mientras que en el sitio activo de la DHFR, además actuaron efectos hidrofóbicos.

Mediante DFT, las energías de los orbitales HOMO y LUMO indican que el partenólido sería una molécula estable, difícil de ionizar, poco polarizable y con baja reactividad química, en tanto que el mapa de potencial electrostático muestra la distribución electrónica en la estructura molecular del partenólido.

Se concluye, que el partenólido presenta actividad antibacteriana frente a cepas de *Staphylococcus aureus* ATCC® 29213, aunque el acoplamiento molecular indica que el partenólido no inhibiría adecuadamente a las tres enzimas de estudio; lo cual sugiere que el partenólido actuaría sobre otras dianas farmacológicas de *Staphylococcus aureus*.

**Palabras clave:** *Staphylococcus aureus* ATCC® 29213, antibacteriano, partenólido, quimioinformática, acoplamiento molecular, DFT