



SIMULACIONES DE COEXISTENCIA DE FASES DE LA FENILALANINA

Jorge L. Rosas Trigueros, Alberto Vela

Departamento de Química, Centro de Investigación y de Estudios Avanzados, Unidad
Zacatenco; México
e-mail: jrosas@ipn.mx

La fenilcetonuria o PKU es un padecimiento que tiene su origen en la incorrecta codificación genética de la enzima fenilalanina hidroxilasa, que tiene la función de metabolizar tirosina a partir de la fenilalanina ingerida con los alimentos. La deficiencia de esta enzima causa acumulación de fenilalanina en forma de fibras citotóxicas que dañan el sistema nervioso central. Los efectos nocivos incluyen retraso mental y epilepsia, que suelen aparecer durante el primer año de vida. Los detalles atomísticos del mecanismo de agregación son aún motivo de debate, debido parcialmente a que las fibras resultantes muestran algunas propiedades semejantes a las encontradas en fibras amiloides. Este trabajo propone simulaciones de coexistencia directa en las que dos fases de la fenilalanina se ponen en contacto en la misma caja de simulación con el objeto de estudiar la auto-organización de estas moléculas y caracterizar la transición entre las fases involucradas. Los resultados permiten proponer un diagrama de fase de la fenilalanina. Estos resultados pueden contribuir a la comprensión del mecanismo de agregación en fibras de la fenilalanina y posteriormente a la propuesta de nuevas terapias para combatir la fenilcetonuria. También podrían encontrar aplicación en el combate a otras enfermedades relacionadas con la agregación de moléculas (e.g. Cistinosis, Alzheimer y Diabetes tipo 2).

Referencias:

Adler-Abramovich, L.; Vaks, L.; Carny, O.; Trudler, D.; Magno, A.; Caffisch, A.; Frenkel, D.; Gazit, E. *Nat. Chem. Biol.* **2012**, 8, 701– 706.
Conde, M. M.; Gonzalez, M. A.; Abascal, J. L. F.; Vega, C. *J. Chem. Phys.* **2013**, 139, 154505.