

Diseño computacional de antioxidantes de la Feniletilamina con posible actividad como neuroprotectores en el tratamiento de Parkinson y Alzheimer.

Resumen:

Gracias a los avances alcanzados en diferentes áreas de la salud la esperanza de vida de la población mundial crece sistemáticamente. En 1950, la proporción de personas mayores de 60 años era del 8%; en 2000, del 10%; y en 2050 se espera que sea del 21%. Si bien esto es un logro también representa un envejecimiento demográfico, o lo que es lo mismo que la proporción de adultos mayores aumenta de forma relativa. Es en esta etapa de la vida donde se desarrollan, con mayor frecuencia, enfermedades neurodegenerativas como lo son el mal de Alzheimer y el Parkinson. Estas enfermedades han sido relacionadas con procesos de estrés oxidativo, razón por la cual, éste se ha convertido en tema de gran interés y numerosas investigaciones se dedican a este tema actualmente. El tratamiento más conocido y aplicado para combatir el estrés oxidativo involucra el consumo de antioxidantes. Estas sustancias pueden considerarse como blancos sacrificables en beneficio de la protección de moléculas de alta importancia biológica, como son las proteínas y el ADN. La eficacia de los antioxidantes depende de su reactividad y es importante conocer en detalle la química asociada a las reacciones de estos compuestos con las especies reactivas presentes en los organismos vivos, en particular radicales libres e iones metálicos. Estudios recientes han comenzado a centrarse en el diseño de antioxidantes multifuncionales, es decir, aquellos que tienen la capacidad tanto de atrapar directamente radicales libres como evitar su formación por medio de la quelación de metales y así evitar su participación en las reacciones de Fenton y Haber Weiss. Realizar este tipo de investigaciones de forma experimental conlleva a la inversión de mucho tiempo así como el uso de un gran número de reactivos y, en consecuencia, a la formación de residuos químicos. El rápido desarrollo de las facilidades de cómputo ha hecho posible el uso de la Química Computacional para estudiar los procesos de estrés oxidativo con resultados prometedores. Utilizando las herramientas de esta disciplina es posible estudiar un mayor número de sistemas en menor tiempo y sin la generación de contaminantes. En este proyecto se estudiará a nivel molecular la capacidad antioxidante de los distintos compuestos obtenidos a partir de la modificación con diferentes grupos funcionales en la feniletilamina, la cual tiene además propiedades como neuroprotector y es útil en el tratamiento de enfermedades neurodegenerativas. El objetivo principal es obtener compuestos con mejor actividad antioxidante que la del compuesto base, es decir, la feniletilamina, pero conservando sus propiedades como neuroprotector.