

# ANÁLISIS DE LA DISTRIBUCION DE FLUJOS METABOLICOS EN LA PRODUCCION DE COMPUESTOS AROMÁTICOS DEL TEQUILA

J. D. Padilla de la Rosa<sup>1</sup>, D. M. Díaz-Montaña<sup>2</sup>, A. Gschaedler<sup>2</sup>  
H. E. Gómez-Hernández<sup>1</sup>, J. Córdova-López<sup>1</sup>, J. M. de Santos Avila<sup>1</sup>, O. González-Reynoso<sup>1</sup>

1. Departamento de Ingeniería Química, CUCEI, Universidad de Guadalajara
2. Centro de Investigación y Asistencia Tecnológica y Diseño del Estado de Jalisco, Av. Normalistas 800. 44720, Guadalajara, Jalisco, México.

Palabras claves: análisis de flujos metabólicos, *Saccharomyces cerevisiae*, compuestos aromáticos, Tequila

## Introducción

El tequila es una bebida alcohólica obtenida de la destilación y rectificación del mosto fermentado de los azúcares de la planta de *Agave tequilana* Weber variedad azul. El aroma, olor y sabor del tequila dependen en gran parte de la presencia y composición de los compuestos organolépticos en el licor. A pesar de que más de 200 compuestos aromáticos han sido identificados en la composición del tequila, estudios demuestran que solo algunos de ellos juegan un papel preponderante en su bouquet [Benn & Peppard 1996]. Por tanto, el análisis y estudio de los factores que afectan la producción de éstos compuestos aromáticos es importante para la industria tequilera para mantener los estándares de calidad y satisfacer la norma mexicana que regula su producción [SECOFI, (1997)]. Así, el presente trabajo tiene como objetivo el análisis de la distribución de flujos metabólicos -principalmente aquellos relacionados con la producción de compuestos aromáticos- en la producción de tequila usando *Saccharomyces cerevisiae*. Estudios *in silico*, y experimentales son realizados variando la fuente de suministro de nitrógeno (orgánica e inorgánica).

## Metodología

La red de reacciones bioquímicas es definida considerando el metabolismo central del microorganismo -glucólisis, ciclo del ácido cítrico, ruta de las pentosas fosfato, el transporte electrónico, fosforilación oxidativa, rutas para la biosíntesis de los componentes de la biomasa (aminoácidos, carbohidratos, lípidos, RNA, DNA)- así como las rutas responsables de la biosíntesis de compuestos aromáticos. Un total de 123 flujos internos y 91 metabolitos definen la red de reacciones bioquímicas. Para las fuentes de nitrógeno orgánicas, el consumo de aminoácidos es simulado añadiendo flujos de intercambio al sistema y para las inorgánicas solo se considera el consumo de amonio. Las técnicas de ingeniería metabólica MFA [Stephanopoulos et al., 1998] y FBA [Schilling & Palsson (1998)] son empleadas para determinar los flujos internos de metabolitos y su distribución en el mapa metabólico. Mediciones

experimentales de las velocidades de consumo de sustratos y formación de biomasa y productos son usadas como restricciones impuestas al sistema metabólico. Técnicas de programación lineal en los lenguajes FORTRAN y MatLab son utilizadas para encontrar la distribución de flujos factibles que satisfagan las restricciones y termodinámica del sistema.

## Resultados y Discusiones

Resultados *in silico* y experimentales para los flujos de metabolitos internos y externos -etanol, acetato, glicerol CO<sub>2</sub> y biomasa- son presentados y analizados, así como para los compuestos aromáticos -alcoholes amílicos, propanol, 2-fenil-etanol, acetaldehído, butanol-. A partir de los resultados obtenidos las producciones de biomasa, etanol y aromas se ven modificadas en función de la fuente de nitrógeno reflejándose en la distribución de flujos internos del metabolismo de la *Saccharomyces cerevisiae*.

## Conclusiones

La relación carbono nitrógeno y el tipo de fuente de nitrógeno influyen notablemente en la producción de compuestos aromáticos así como en los rendimientos de producción de biomasa y etanol.

## Bibliografía

- Benn, S.M. & Peppard, L.T. (1996) *Characterization of tequila flavour by instrumental and sensory analysis*. J. Agric. Food Chem **44**, 2: 557-556
- Schilling, C.H., & Palsson, B.O. (1998) *The underlying pathway structure of biochemical reaction networks*. Proc. Natl. Acad. Sci. **95**, 4193-4198
- Secofi (1997) *Norma Oficial Mexicana NOM-006-SFI-1994 bebidas alcohólicas-Tequila- Especificaciones*. Mexico
- Stephanopoulos, G.N., Aristidou, A. A., Nielsen, J. (1998) *Metabolic Engineering: Principles and Methodologies*. San Diego: Academic Press

