



EFECTO DEL PUENTE DE HIDRÓGENO INTRAMOLECULAR SOBRE LOS SITIOS REACTIVOS DE LA DOPAMINA

E. García-Hernández¹, J. Garza²

¹ Departamento de Posgrado e Investigación, División de Mecatrónica, Instituto Tecnológico Superior de Zacapoaxtla, Carretera Acuaco-Zacapoaxtla Kilómetro 8, Totoltepec, C.P. 73680. Zacapoaxtla Puebla; México.

² Departamento de Química, División de Ciencias Básicas e Ingenierías. Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa. San Rafael Atlixco 186, Col. Vicentina, Iztapalapa. C. P. 09340. México D. F.; México.

erwin.garcia@live.itsz.edu.mx

La dopamina es un neurotransmisor producido de forma natural en el cuerpo humano. Éste, juega un papel importante en la regulación de los sistemas endócrino y nervioso, además en órganos involucrados en el control motor y funciones neuroendócrinas.¹ Niveles no adecuados de este neurotransmisor están asociados a enfermedades neurológicas como Parkinson, donde los niveles son bajos y esquizofrenia, donde hay alta cantidad de dopamina.²⁻⁴ Hay estudios donde se le atribuyen ciertas propiedades a dicho compuesto, tal como la capacidad antioxidante y atrapadora de radicales libres.⁵ Es importante recalcar que la fracción catecol es la que le confiere tales propiedades a la dopamina, siendo de gran interés el realizar un estudio teórico desde el punto de vista de la teoría de funcionales de la densidad conceptual donde se vea el impacto que tiene la orientación de los grupos OH en esta fracción.

El presente trabajo muestra un estudio de estructura electrónica de la dopamina tomando en cuenta dos conformaciones, una en la que los grupos hidroxilos forman un puente de hidrógeno intramolecular y otra con orientación contraria. De los resultados obtenidos, se concluye que los índices globales de reactividad no se ven afectados de manera dramática por el puente de hidrógeno intramolecular, mientras que los predictores locales, claramente muestran un cambio en los sitios reactivos cuando está y no está presente esta interacción.

1. J. R. Cooper, F. E. Bloom and R. H. Roth, *The Biochemical Basis of Neuropharmacology*; Oxford University Press, New York, 1986.

2. Birkmayer, W.; Riederer, P. *Understanding the Neurotransmitters: Key to the Workings of the Brain*; Springer-Verlag: New York, 1989.

3. Mathews, C. K.; Van Holde, K. E. *Biochemistry*; The Benjamin/Cummings Publishing Company, Inc.: Menlo Park, CA, 1996.

4. J. Liu and A. Mori, *Arch. Biochem. Biophys.*, **1993**, 302, 118.

5. Cristina Iuga, J. Raul Alvarez-Idaboy, and Annik Vivier-Bunge, *J. Phys. Chem. B*, **2011**, 115, 12234.