

UNIVERSIDAD NACIONAL PEDRO HENRÍQUEZ UREÑA

FACULTAD DE CIENCIA Y TECNOLOGÍA
ESCUELA DE QUÍMICA

Título:

“Simetría Funcional Cerebral: Una aproximación sencilla a HMO.

Evaluación Teórica en Neurotransmisores: Nivel II y III.”



Trabajo de Grado presentado por:

María Alfonsina Luna Torres

Yissel Familia Martínez

Para la obtención del grado de

Ingeniero Químico

Santo Domingo, D.N.

2017

AGRADECIMIENTOS

AGRADECIMIENTOS

En primer lugar, agradecer a Dios todopoderoso. A mis padres, María Teresa Torres e Idelfonso Luna, mis guías. A mis tías: Gloria, Nereyda, Juana y Marisol; A mi abuela, Felicia Henríquez.

A todos mis compañeros y compañeras de carrera, por su apoyo y momentos compartidos: Jheffray, Nicole, Lissa, María, Susan, Pamela, Kevin, Martín, José Luis, Alicia, Aniel, Gregory, Winter, Guillermina, Elizabeth, Franchesca, Ámbar y en especial a Raisa Pérez y Emely Rodríguez.

A mi compañera de trabajo de grado, Yissel Familia Martínez, a quien considero una gran amiga y colega. También a Misael Ovalle, por todo el entusiasmo y buenos deseos.

A mis maestros y maestras, a quienes agradezco mi formación profesional: Doris Peña, Maribel Espinosa, Nurys Gómez, Mayra Sánchez, Josefina Castillo, Porfirio Alcántara, Omayra Reynoso, Elizabeth Mejía, Rafael Rodríguez, Carlos Sanlley, Sandra Miniño, Jeanne Mena, María Alexia Troncoso, Milagros Patricia López, Nancy Paulino, Francisco Herrera.

A mi maestro y asesor, Dr. Jesús Gilberto Concepción, dueño de mi gran admiración, a quien agradezco enormemente el tiempo dedicado durante la elaboración de este trabajo de grado y por todas sus enseñanzas. En definitiva, quedará en mi memoria por siempre su gran legado.

María Alfonsina Luna

AGRADECIMIENTOS

Agradezco a Dios por guiarme siempre en el transcurso de mi carrera, por ser mi fortaleza en momentos de debilidad y por darme la sabiduría para adquirir valiosos conocimientos.

Le doy gracias a mis padres Lourdes María Martínez Melo y Manuel Nicasio Familia Alcántara a quienes considero un ejemplo a seguir, por ser el soporte que siempre necesité, por los valores que me han inculcado, por darme la oportunidad de tener una excelente educación a lo largo de mi vida y sobre todo agradezco los sabios consejos que me dieron en el momento indicado, para así continuar con un buen balance en la vida y tomar las mejores decisiones en cada situación.

A mis hermanos Samuel, Ismael, Annabel, Jeanfrey y Jairo de quienes he recibido apoyo en cada momento. Gracias por cada uno de sus aportes, por seguir el margen de unión familiar, y por la motivación dada en el día a día en este importante camino que he recorrido. Así mismo quiero agradecer a alguien que considero parte de mi familia, Samuel Alcántara Corcino, gracias por apoyarme en cada momento y contagiarme de energía positiva.

A mi tío José Martínez por estar siempre ahí para mí, apoyándome y ayudándome en todo lo que necesité para finalizar esta etapa.

A mis compañeros de carrera que siempre estuvieron compartiendo conmigo este gran paso de mi vida y juntos viviendo experiencias extraordinarias: Susan, Jheffray, Lissa, María, Nicole, Kevin, Pamela, Jose Luis, Martín, Alicia, Gregory, Aniel, Elizabeth, Winter, Franchesca, Guillermina y Ámbar. De igual manera a mis compañeras Emely Rodríguez y Raisa Pérez a quienes agradezco infinitamente.

A mi compañera de trabajo de grado, María Alfonsina Luna por formar parte importante de esta meta, por cada conocimiento compartido, por su gran esfuerzo y dedicación para juntas finalizar de manera exitosa.

A cada uno de mis profesores y profesoras por las enseñanzas que me dieron y por cada consejo que recibí, para que con buen desempeño siguiera el camino hacia el éxito y el mundo de las oportunidades. Especialmente a mis profesoras Josefina Castillo, Doris Peña, Milagros Patricia López y Maribel Espinosa.

A mi profesor y asesor de trabajo de grado Jesús Gilberto Concepción a quien felicito por sus logros en el mundo de la ciencia y agradezco inmensamente cada uno de sus aportes para culminar este recorrido de manera exitosa, por cada una de sus enseñanzas en cuanto a lo que vivo que es la Química, la Ciencia, las investigaciones, y otras áreas.

A mis amigos y cada una de las personas que de una manera u otra aportaron su granito de arena para ayudarme, por darme su apoyo incondicional en cada momento necesitado, por formar parte de mi vida profesional, por su amistad, consejos, apoyo, ánimo y compañía. Quiero darle las gracias por sus buenas vibras y por todas sus bendiciones.

Yissel Familia

DEDICATORIAS

DEDICATORIA

Dedico este trabajo de grado a Dios, mi gran fortaleza. De forma especial a mi madre María Teresa Torres; a tía Gloria, abuela Fela, tía Juana, tía Nereyda y al Sr. Daniel Jiménez. Sin ustedes no hubiera sido posible.

María Alfonsina Luna

DEDICATORIA

Dedico este trabajo de grado a Dios, a mis padres, hermanos, amigos, profesores y cada una de las personas que aportaron para que esta meta sea culminada de manera exitosa.

Yissel Familia

INDICE

Agradecimientos.....	i
Dedicatorias.....	v
Índice.....	8
Introducción.....	11
Objetivos.....	16
Justificación.....	18
Alcance.....	19
 PRIMERA PARTE: FUNDAMENTOS TEÓRICOS	
Capítulo I: Antecedentes.....	21
Capítulo II: Marco Teórico.....	24
II.1 Sistema nervioso y las neuronas.....	24
II.1.1 Las Neuronas.....	24
II.1.2 Sinapsis.....	26
II.2 Los Neurotransmisores.....	27
II.3 Los Neurotransmisores Bencénicos.....	29
II.3.1 Dopamina.....	29
II.3.2 Noradrenalina.....	31
II.3.3 Serotonina.....	32

II.4 El Benceno.....	34
II.5 Aproximaciones de Huckel.....	37
II.6 Aplicación de las aproximaciones de Huckel al Sistema Nervioso: La Simetría Funcional Cerebral.....	44
II.7 Efecto Inductivo.....	45
II.8 Los Niveles de Energía del Cerebro.....	48
II.9 Desarrollo de un modelo para los niveles de energía del cerebro y el Benceno.....	51
II.9.1 Desarrollo del Modelo: Niveles de Energía del Benceno.....	52
II.9.2 Niveles I y IV del Cerebro.....	53
II.9.3 Niveles II y III del Cerebro.....	55

SEGUNDA PARTE: MÉTODO DE INVESTIGACIÓN

Capítulo III: Método de Investigación.....	59
III.1 Selección de un programa de computadora para realizar cálculos de la aproximación de Huckel.....	59
III.2 Uso de SHMO para calcular las energías de los Orbitales Moleculares, OM degenerados IV y V del benceno sustituido similares a los de neurotransmisores.....	60
III.3 Observaciones en el transcurso de los cálculos en SHMO.....	61
III.4 Realización de gráficas correspondientes al comportamiento de las energías de los OM V y V del benceno en función al efecto inductivo.....	62

TERCERA PARTE: RESULTADOS

Capítulo IV: Resultado Obtenidos.....	65
---------------------------------------	----

Capítulo V: Análisis e Interpretación de los resultados.....	72
--	----

CUARTA PARTE: CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES

Capítulo VI: Conclusiones.....	75
--------------------------------	----

Capítulo VII: Recomendaciones.....	76
------------------------------------	----

QUINTA PARTE: REFERENCIAS

Capítulo VIII: Referencias.....	77
---------------------------------	----

VIII.1 Bibliografía.....	78
--------------------------	----

VIII.2 Artículos y Publicaciones Consultadas.....	79
---	----

VIII.3 Webgrafía.....	80
-----------------------	----

SEXTA PARTE: ANEXOS

Anexo I: Figuras.....	82
-----------------------	----

Anexo II: Tablas.....	100
-----------------------	-----

Anexo III: Aproximaciones de Huckel para el etileno y el butadieno.....	105
---	-----

Anexo IV: Trabajos hechos por J. Gilberto Concepción en Symmetry Dynamics in Leadership and management, 2006.....	111
---	-----

Anexo V: El programa SHMO. Descripción y Uso básico.....	113
--	-----

Anexo VI: Gráficos Adicionales.....	117
-------------------------------------	-----

Anexo VII: Ecuaciones.....	121
----------------------------	-----

Anexo VIII: Glosario.....	123
---------------------------	-----

INTRODUCCIÓN

INTRODUCCIÓN

El cerebro es el órgano que nos hace pensar, sentir, desear y actuar. Es el asiento de múltiples y diferentes acciones tanto conscientes como no conscientes, que nos permiten responder a un mundo en continuo cambio y que demanda respuestas rápidas y precisas. Pitágoras enseñaba que el cerebro tenía que ver con la razón, mientras que Hipócrates tiempo más tarde afirmó que el cerebro estaba relacionado con el pensamiento.

Se ha comprobado que el cerebro tiene cuatro niveles de energía: delta, teta, alfa y beta. Existen publicaciones científicas que tratan sobre los cálculos de orbitales moleculares de neurotransmisores, sin embargo, no hay un planteamiento que envuelva la explicación de un modo que se pueda incluir los cuatro niveles a la vez.

El cerebro tiene aproximadamente 100 mil millones de células nerviosas, neuronas. Las neuronas son los ladrillos con los que está construido el cerebro y su propiedad más desarrollada es recibir, procesar y transmitir información mediante la emisión de impulsos bio-eléctricos a cientos de otras neuronas. Otra parte importante del cerebro es el cuerpo caloso el cual es una de las principales comisuras interhemisféricas de mayor tamaño y conecta transversalmente ambos hemisferios.

Nuestro cerebro está compuesto de dos hemisferios el derecho y el izquierdo, cada uno de ellos con funciones específicas. Podrían entenderse como dos inmensos procesadores, que están conectados a través de millones de fibras nerviosas por el cuerpo caloso, que permite la interacción recíproca entre ellos.

El neurólogo Roger Sperry, ganador del premio Nobel de medicina en 1981 por sus trabajos acerca de las funciones de los hemisferios cerebrales. Sperry descubrió que ambos lados del cerebro son diferentes y que tienden a dividirse las principales funciones intelectuales. El hemisferio derecho es dominante en los aspectos del intelecto, en funciones no verbales o espaciales, es el sintetizador, el de la estructura total y la imaginación.

El campo visual humano está dividido en mitades: a una le corresponde el hemisferio derecho del cerebro, a la otra el izquierdo. Cada ojo tiene este doble campo, a diferencia de los oídos, que casi por entero corresponden cada uno a un hemisferio cerebral. Sperry eligió como sujetos de investigación a pacientes que, por diversas causas, tienen desconectados ambos hemisferios, es decir, han sido callosotomizados, el cuerpo calloso es la principal unión entre los hemisferios.

El hemisferio izquierdo se especializa en funciones verbales y matemáticas, es el analizador, es lógico y secuencial. Jerry Levy descubrió que el procesamiento de ambos hemisferios a pesar de sus diferencias son comparables en complejidad. Cada mitad tiene su propia forma de conocimiento y su manera de percibir el entorno. Sin embargo, es importante observar que aunque cada uno tenga sus especialidades, hay intersección entre ambos.

Todas las actividades que se enmarcan dentro del sistema nervioso tienen su explicación a través del entendimiento de la energía acumulada en uno de los cuatro niveles. El deporte, la educación, el liderazgo, la música, la felicidad, la alegría, el sexo, las enfermedades, etc. Pueden ser explicadas conociendo el nivel de energía estimulado y como interaccionan los neurotransmisores al nivel de la acción de los electrones superiores en los niveles de orbitales moleculares que conforman la estructura química de las moléculas que intervienen en el proceso.

Desde la aparición de la técnica de resonancia spin electrónica se han estudiado los sistemas que envuelven la formación de radicales, aniones radicales y cationes radicales. Cuando se estudia la función cerebral los aniones radicales de derivados de Benceno juegan un papel importante ya que el cuerpo humano funciona mejor a niveles básicos de pH. Desde la publicación de G. Stevenson y J. Concepción que demostraron que la separación de los orbitales degenerados HOMO "Highest Occupied Molecular Orbital" o el orbital molecular ocupado de mayor energía de aniones radicales de ciclooctatetraeno siguen un relación de distribución de Boltzman y tienen una relación lineal con los efectos inductivos de los sustituyentes; ha provocado que se investigue

más a fondo sobre esta relación en los aniones radicales de Benceno, cuyo efecto se observa en los orbitales degenerados LUMO " Lowest Unoccupied Molecular Orbital " o el orbital molecular no ocupado de más baja energía. Esto ha permitido relacionar los aniones radicales de Benceno a las estructuras similares de los neurotransmisores y por ende al campo de la neurociencia.

En los últimos cuarenta años se han realizado investigaciones sobre los procesos de interacción intermolecular e intramolecular de sistemas de aniones radicales, G., Stevenson, Concepción, G., Echegoyen, L., 1974, que son estructuras similares a los neurotransmisores y han permitido entrar de lleno en la neurociencia. Con el trabajo, "Viaje al fondo de la mente", Concepción definió el concepto de inteligencia dinámica, en el año 1996, desarrollando el Sistema de Evaluaciones Dinámicas SED© usado gerencialmente para determinar el índice de coordinación del pensamiento asociado a cuatro estados básicos de inteligencia analítica, practica, social y creativa. Posteriormente este modelo se asocio con el modelo energético del anión radical de Butadieno que tiene cuatro centros de Carbono; esto fue la primera contribución asociando la teoría de Orbitales Moleculares, Concepción, G., 2006. Los primeros intentos asociando esta teoría a los neurotransmisores fue presentado en el primer congreso mundial de química celebrado en el continente americano fuera de los Estados Unidos, Concepción, G., 2011.

El Benceno puede ser relacionado con el inicio de la vida. Se encuentra en los aminoácidos esenciales, Tirosina y Fenilalanina. En el cerebro, el benceno tiene una función importante a nivel de neurotransmisores. Es aquí donde conviene mencionar que diversos neurotransmisores tienen Benceno en su estructura, entre ellos: la Serotonina, la Dopamina y sus derivados. Cabe mencionar el caso especial de la Melatonina, una hormona con funciones importantes durante el sueño, la cual tiene un Benceno en su estructura y es muy similar a la Serotonina.

Este trabajo de grado está dividido por partes, la primera está comprendida por el marco teórico y temas para la comprensión de la investigación, en la segunda se mostrará el método de investigación realizado para desarrollar dicho trabajo de grado. En la tercera

parte se dará a conocer los resultados obtenidos y el análisis de los mismos.

En la cuarta parte se encontrarán las conclusiones y algunas recomendaciones a seguir para quienes les interese estudiar estos temas. La quinta mostrará las referencias consultadas. Por último en la sexta parte se presentarán los anexos sobre figuras, tablas y otros recursos de interés.

OBJETIVOS

OBJETIVOS

Objetivo General

Desarrollar un modelo para explicar de forma general la acción de neurotransmisores en el sistema nervioso central, haciendo uso de la teoría de orbitales moleculares utilizando una aproximación simple a la teoría de Huckel.

Objetivos Específicos

- Exponer la teoría de Huckel para realizar los cálculos en la molécula del Benceno y sus derivados.
- Demostrar la importancia de las ciencias básicas y en especial la química física para explicar los efectos de neurotransmisores bencénicos que actúan en el sistema nervioso.
- Desarrollar un modelo que puede explicar de forma generalizada los niveles de energía del cerebro.
- Verificar que este modelo puede usarse para explicar la acción de neurotransmisores bencénicos en el sistema nervioso.
- Utilizar la teoría de orbitales moleculares usando una simple aproximación de teoría Huckel para demostrar la incidencia de los efectos inductivos de sustituyentes en la molécula de Benceno.
- Demostrar mediante cálculos que existe una relación entre la separación de los dos orbitales degenerados, simétrico y asimétrico, que posee el benceno en neurotransmisores en moléculas derivadas de este.

JUSTIFICACIÓN

Con la realización de este proyecto de fin de grado se pretende dejar bases implementadas para investigaciones posteriores en el área y su interacción con la química, medicina, la educación, deporte, alimentación y bienestar personal; Además, se pretende ser parte de investigaciones científicas que justifiquen el desarrollo de un Instituto de Neurociencias en la UNPHU enfocado en las ciencias básicas con el apoyo multidisciplinario de las diferentes facultades y escuelas.

A través de un gran número de investigaciones se ha ido demostrando la importancia de los neurotransmisores, las cuales han abierto un mundo de posibilidades en las que continuamente se consiguen importantes progresos. Actualmente existe un enorme interés sobre este tema en la comunidad científica en el área de neurociencia. Un grupo de científicos ha desarrollado una nueva vía para estudiar el papel de un neurotransmisor clave en trastornos tales como epilepsia, Parkinson, ansiedad, insomnio, depresión, esquizofrenia y adicción al alcohol.

Los neurotransmisores son sustancias químicas enviadas para hacer que otras células cambien sus respuestas eléctricas. Estas sustancias interactúan con receptores especiales ubicados en la membrana celular externa. Estos receptores se forman dentro de la célula, y luego son transportados hasta diferentes lugares en la membrana, donde esperan a que lleguen neurotransmisores. Comprender cómo funcionan a nivel de energía de los orbitales moleculares de estos receptores y cómo llegan hasta diferentes lugares de la membrana celular es un paso crítico hacia el desarrollo de nuevos fármacos que actúen sobre enfermedades que afectan a la química del cerebro.

Miembros de la comunidad científica que quieran empezar una nueva línea de investigación pueden encontrar aquí una aproximación inicial y un contexto general en el que situarse.

ALCANCE

Existe una amplia variedad de neurotransmisores. En investigaciones anteriores realizadas por el Dr. Jesús Gilberto Concepción, investigador y profesor emérito de la UNPHU, se estudiaron algunas de esas sustancias asociadas con los niveles de energía del cerebro. En este trabajo de grado el enfoque es hacia los neurotransmisores bencénicos, Dopamina, Serotonina y estructuras similares.

Se presentará la función del Benceno a nivel de neurotransmisores debido a las posiciones de sustitución y las características inductivas de los sustituyentes para explicar su influencia en el segundo y tercer nivel energético del cerebro, teta y alfa. Los resultados están basados en gráficas y tablas, mediante el uso de un programa web de modelos moleculares de Huckel que facilita la Universidad de Calvary como recurso educativo gratuito.

PRIMERA PARTE
FUNDAMENTOS TEÓRICOS

CAPÍTULO I: ANTECEDENTES

La neurociencia ha sido, es y seguirá siendo el área más importante en el desarrollo del ser humano. Por qué pensamos, cómo pensamos, cómo nos distinguimos unos de otros, cómo podemos mejorar y cómo podemos tener mejor salud está estrechamente asociado al Cerebro, Longstaff, 2000. A finales de siglo XIX, Santiago Ramón y Cajal situó por vez primera las neuronas como elementos funcionales del sistema nervioso. Cajal propuso que actuaban como entidades discretas que, comunicándose, establecían una especie de red mediante conexiones especializadas o espacios, *Ver Anexo I, Figura 31*.

Desde que Cajal hizo los primeros dibujos de una neurona la ciencia no se ha parado de estudiar e interpretar como estas funcionan, Schoonover, 2004. Los estudios de Hudson y Hodgkin en Inglaterra demostraron el intercambio Sodio/ Potasio a través de las membranas de las neuronas. Sperry continuó con la explicación de dos hemisferios cerebrales y la función de cada uno. Luego se entendió que esta máquina tiene energía y que se pueden describir cuatro niveles de energía de acuerdo al estado de la persona, sueño profundo, despertando, despierto consciente y ansioso. La década de los noventa fue dedicada al estudio del cerebro. Se describió cómo funcionaba el motor neuronal con la acción de la bomba Sodio/Potasio.

Daniel Amen, psiquiatra, ha realizado estudios del cerebro a través de imágenes y ha escrito más de veinte libros en el cual explica la importancia de estudiar estas imágenes con la finalidad de poder diagnosticar y medicar, Amen, 2000. Por lo regular la mayoría de las investigaciones se hacen con el propósito de determinar y explicar anomalías en el cerebro como en otras partes del cuerpo. Sin embargo Amen hace énfasis en cómo es la imagen de un cerebro normal y qué hacer para que este funcione mejor. En su último libro indica por primera vez la importancia de tener una imagen cerebral simétrica, Amen, 2012.

El conocimiento en cuanto al funcionamiento del cerebro se ha ido aumentando con el transcurso del tiempo y algunos científicos han utilizado la ciencia básica ya que se

conoce y se ha comprobado que el cerebro es una máquina que funciona con impulsos eléctricos que permiten que los axones de las neuronas sean una carretera por la cual transitan los neurotransmisores gracias a la bomba Sodio Potasio. Se ha asociado el funcionamiento del cerebro tratándolo desde el punto de vista de la mecánica cuántica, sin embargo todos los conceptos lo hace de forma generalizada y no han explicado porque las personas piensan diferente, Jibu, 1995. Penrose, ha explicado este concepto con bastante profundidad en sus tratados, Penrose R, 1999. Es el primero que propone que debemos utilizar la cosmología ya que la ciencia asociada a esta es similar a la que usamos para describir los átomos y las moléculas, la simetría, Lederman, 2004, Hawking, 2001, Kaku, 2014.

El presidente Obama mostró interés en que se llegue a niveles más profundos y ha vuelto a dar un impulso a la neurociencia haciendo que esta se vuelque a la ciencia básica donde de nuevo la química física va a jugar un papel transcendental. Ya los primeros resultados se están empezando a publicar y las imágenes de neuronas por el grupo de Harvard han logrado bajar a niveles de micrones viendo neuronas de ratones, Zimmer, 2014. Lo más importante de estos estudios es que ahora se sabe que las dendritas de una neurona no se adhieren a muchas neuronas, sino a una en particular. De nuevo se indica que no se tiene una explicación y que esta tiene que venir de una forma muy sencilla, Yuste, 2014.

El modelo del funcionamiento del cerebro y la pregunta porque pensamos diferente podría tratarse como una combinación física química de factores a que envuelven muchos de los conceptos tratados. La bomba Sodio Potasio que sirve para acelerar el movimiento de los neurotransmisores podría explicarse como un sistema de pares iónicos donde la interacción de los cationes con aniones de neurotransmisores se ven afectadas por el solvente, la temperatura, la concentración de iones. La ruta de los neurotransmisores se puede ver afectada y estos tomar diferente posición influenciadas por el momento magnético de estos aniones, Kuo, 2004.

Desde los años 70 se vienen estudiando estos fenómenos con cationes de Sodio y Potasio y aniones radicales de Ciclooctatetraeno, Nitrosaminas y otros, Stevenson & Concepción, 1973, Stevenson, Concepción, Castillo 1973. También se ha estudiado sobre

la interacción de sustituyentes en aniones radicales y cómo podemos explicar las características de estos aniones radicales usando el modelo de orbitales moleculares de Hückel para predecir las energías, las densidades electrónicas y simetría en diferentes estructuras, Stevenson, 1974.

Los primeros intentos de asociar la teoría de orbitales moleculares a compuestos con actividad neuronal fueron los de Carl R. Cerril en 1965 quien estudió moléculas bioquímicas eufóricas como la Mescalina. Hay muchos estudios relacionando los neuromedicamentos a través de los estudios teóricos. Sin embargo debido a la complejidad de estos cálculos no son utilizados para hacer predicciones.

CAPÍTULO II: MARCO TEÓRICO

II. 1 El Sistema Nervioso y las neuronas

El Sistema nervioso es definido como energía que fluye a través del organismo de los seres vivos. El cerebro, con sus cuatro niveles de energía, gobierna el sistema nervioso haciendo que cada individuo tenga su manera particular para controlar su intelecto y sus emociones. La producción y distribución de este sistema eléctrico se ha planteado que no es la misma en los individuos, lo que nos hace a cada uno diferente. El sistema nervioso es el encargado de coordinar e integrar las funciones vitales del organismo, tanto para el mantenimiento de la homeostasis como para la adaptación del organismo al medio en el que se desarrolla.

El sistema nervioso es único en cuanto a la vasta complejidad de las acciones de control que puede llevar a cabo. Recibe literalmente millones de fragmentos de información a partir de los diferentes órganos sensitivos y luego los integra a todos para determinar la respuesta que realizará el cuerpo. La mayor parte de las actividades del sistema nervioso son iniciadas por experiencia sensitiva que emana de receptores sensitivos, ya sean receptores visuales, auditivos, táctiles sobre la superficie del cuerpo o de otros tipos, Guyton, 1989.

II.1.1 Las Neuronas

El funcionamiento cerebral y del sistema nervioso, se basa en las actividades de las neuronas, que sintetizan sustancias químicas, para el metabolismo y el funcionamiento integral de los órganos. La neurona no puede trabajar aislada, ya que necesita de un contacto y comunicación con otras células afines o diferentes en estructura; para ello envía mensajes a través de las uniones sinápticas, las cuales sirven para integrar y hacer funcionar el proceso de la neurotransmisión.

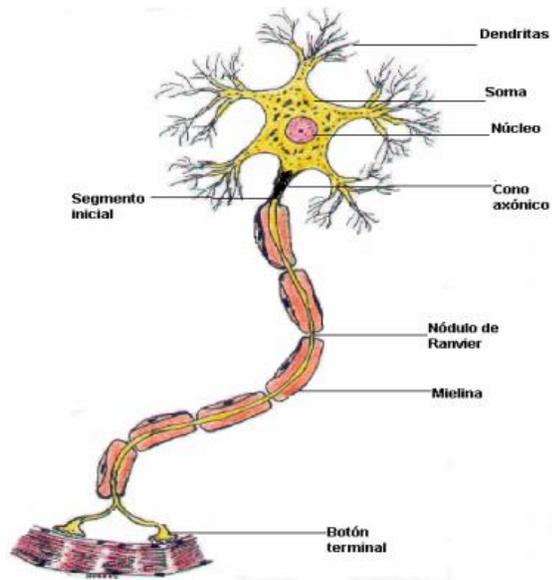


Fig. 1. Descripción de una neurona.

Las neuronas tienen dos funciones principales, la propagación del potencial de acción a través del axón y su transmisión a otras neuronas o a células efectoras para inducir una respuesta. La conducción de un impulso a través del axón es un fenómeno eléctrico causado por el intercambio de iones Na^+ y K^+ a lo largo de la membrana. En cambio, la transmisión del impulso de una neurona a otra o a una célula efectora neuronal depende de la acción de neurotransmisores específicos sobre receptores también específicos.



Fig. 2. Interacción de los iones sodio y potasio en la membrana plasmática de las neuronas.

II.1.2 Sinapsis

Charles Sherrington, comienzos del siglo XX, estableció el concepto de sinapsis para designar una zona especializada de contacto por el cual una neurona se comunica con otra.

Tipos de sinapsis.

- Sinapsis de tipo eléctrico: unión física entre las neuronas mediante uniones de tipo GAP o uniones de hendidura.
- Sinapsis de tipo químico: Requieren una sustancia química denominada neurotransmisor.

Sinapsis de tipo químico. En ellas se diferencian tres elementos:

- Terminal presináptico.
- Espacio sináptico.
- Terminal postsináptico.

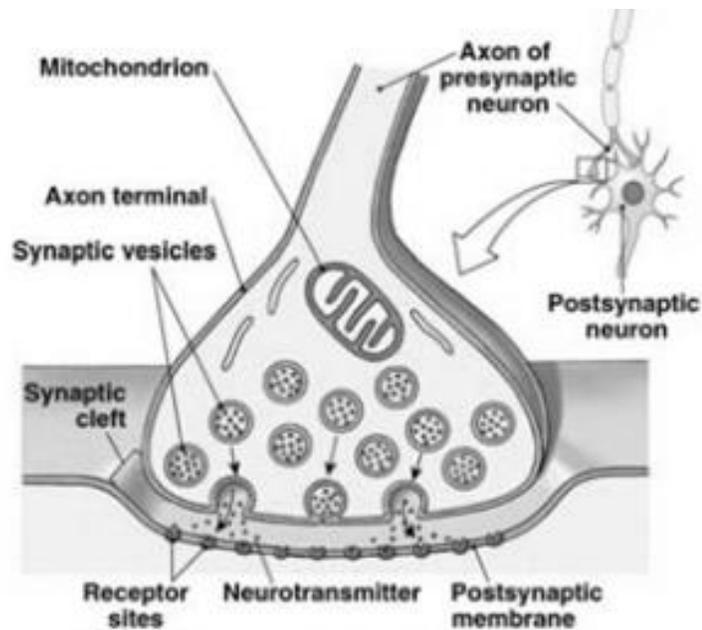


Fig. 3. Descripción de la Sinapsis.

II. 2 Los Neurotransmisores.

La mente ha sido considerada un mundo complejo, donde interactúan una serie de fenómenos físicos, biológicos y químicos, en relación a esta última parte se hace una descripción de los neurotransmisores y su influencia en el comportamiento. Estas moléculas químicas serán los responsables de los cambios orgánicos y de conducta, cuando se manifiestan en el comportamiento de los seres humanos.

La importancia de las moléculas en la actividad mental, vino a evidenciarse cuando se descubrieron sustancias químicas que generaban alteraciones notorias y reproducibles en los patrones del pensamiento, percepción y estado de ánimo. Si una sustancia química puede alterar en forma específica la mente, es de suponer que la actividad mental normal también puede depender de ciertas moléculas presentes en el cerebro.

Los neurotransmisores son las sustancias químicas que se encargan de la transmisión de las señales desde una neurona hasta la siguiente a través de la sinapsis. Casi todas las sinapsis utilizadas para transmisión de señales en el sistema nervioso central son químicas. La primera neurona segrega una sustancia química llamada neurotransmisor en la sinapsis, el cual actúa sobre proteínas receptoras en la membrana de la neurona siguiente para inhibirla o excitarla. Se han descubierto alrededor de 30 sustancias transmisoras diferentes, Guyton, 1987.

Para que una sustancia pueda considerarse neurotransmisor debe cumplir cuatro requisitos:

- Que se sintetice en la neurona.
- Que esté presente en el terminal presináptico y se libere en cantidades suficientes y además ejerza un efecto definido sobre la neurona postsináptica u órgano efector.
- Que su administración exógena en concentraciones razonables mimetice los efectos endógenos.
- Que exista un mecanismo de inactivación.

Existen cuatro clases distintas de sustancias transmisoras:

Clase 1: La Acetilcolina.

Clase 2: Varias Aminas diferentes.

Clase 3: Varios Aminoácidos diferentes.

Clase 4: Péptidos Neuroactivos.

TABLA 1

CLASIFICACIÓN DE LOS NEUROTRANSMISORES

CLASE 1
Acetilcolina
CLASE 2: Aminas
Norepinefrina Epinefrina Dopamina Serotonina
CLASE 3: Aminoácidos
Ácido Amino butírico, Gaba Glicina Glutamato
CLASE 4: Péptidos.

II.3 Neurotransmisores bencénicos

Los Neurotransmisores bencénicos son aquellos que poseen en su estructura química un anillo benceno. A continuación se describen los principales:

II.3.1 Dopamina

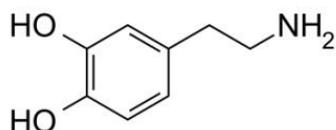


Fig. 4. Estructura de la Dopamina.

La Dopamina; 3,4 dihidroxifeniletilamina, es principalmente un neurotransmisor inhibitorio. Este neurotransmisor participa en el mantenimiento del estado de alerta. Se deriva del aminoácido tirosina y la síntesis es por la misma vía para la noradrenalina. Según su estructura química la dopamina es un Feniletilamina, es decir un Catecolamina que cumple funciones de neurotransmisor en el sistema nervioso central. La Dopamina está fuertemente relacionada con los mecanismos de recompensa en el cerebro. Las drogas como la Cocaína, el Opio, la Heroína y el alcohol promueven la liberación de Dopamina, de igual modo que lo hace la Nicotina.

Su principal función es lograr una mayor coordinación del movimiento muscular. Poca Dopamina en las áreas motoras del cerebro es responsable de la enfermedad de Parkinson, la cual implica temblores corporales incontrolables y falta de coordinación de los movimientos musculares. Se la relaciona con funciones motrices, las emociones y los sentimientos de placer.

La Dopamina se libera en neuronas que se originan en una zona del cerebro llamada sustancia negra, y están conectadas con otra conocida como cuerpo estriado, que desempeña una función importante en el control del sistema musculoesquelético, coordinar el movimiento; desempeña un papel clave en la conducta humana, y se le conoce como el neurotransmisor de la felicidad. Otros científicos lo llaman el

neurotransmisor del aprendizaje, de la atención y de la memoria, porque tiene un efecto despolarizador en las neuronas, que hace que estén más dispuestas a dispararse favoreciendo una eficiente comunicación entre las neuronas, Ortiz, 2007, pág. 78.

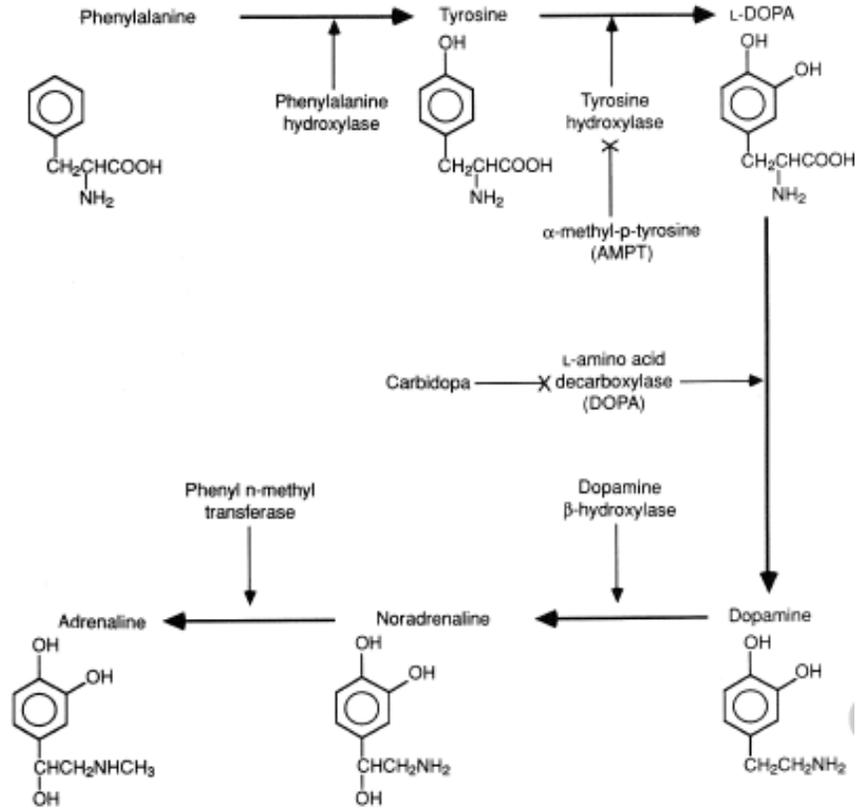


Fig. 5. Síntesis de las Catecolaminas.

Como se describe en la figura anterior, la Dopamina es producida por el aminoácido Tirosina. Una pequeña parte de la Tirosina se deriva de la Fenilalanina por un proceso de hidroxilación. La Dopamina se sintetiza a través de los mismos pasos enzimáticos que la Noradrenalina: la Tirosina-hidroxilasa convierte la Tirosina en DOPA; la DOPA-descarboxilasa la convierte en Dopamina. Una vez liberado el neurotransmisor puede ocupar receptores postsináptico, metabolizarse, recaptarse u ocupar autorreceptores.

II.3.2 Noradrenalina

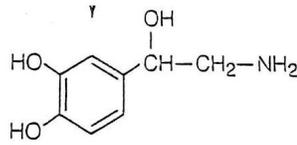


Fig. 6. Estructura de la Noradrenalina.

La Noradrenalina es el neurotransmisor por excelencia de las neuronas posganglionares del sistema nervioso simpático. Alteraciones de la neurotransmisión mediada por noradrenalina están asociadas a enfermedades del afecto como depresión, trastornos de ansiedad y procesos fisiológicos como el estado de alerta, atención y respuestas al estrés. Numerosos antidepresivos bloquean la recaptación de Noradrenalina en la sinapsis, Toro, 2010, pág. 30.

La Noradrenalina está presente en las terminaciones nerviosas, donde transmite los impulsos nerviosos y es considerado como el neurotransmisor Norepinefrina, Ortiz, 2007, pág. 81. La Noradrenalina es parte de la familia de las Catecolaminas, las cuales se sintetizan a partir de la tirosina en el cerebro, las células cromafines, los nervios y ganglios del sistema nervioso.

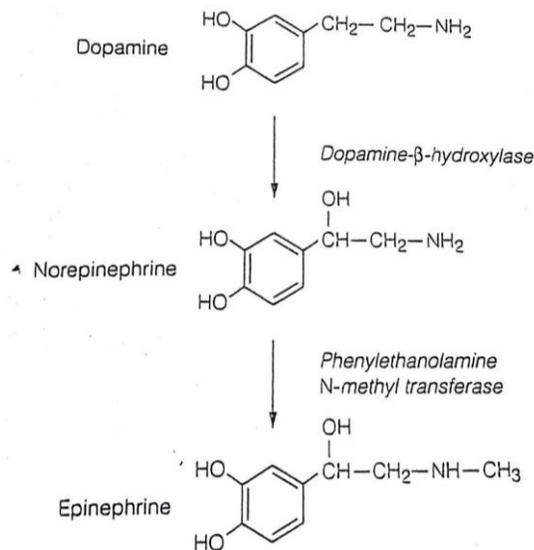


Fig. 7. Síntesis de la Noradrenalina o Norepinefrina.

II.3.3 Serotonina

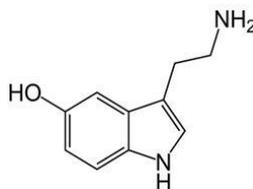


Figura 7. Estructura de la Serotonina.

La Serotonina es un neurotransmisor relacionado con la emoción y el estado de ánimo. Interviene en otros neurotransmisores conocidos como la Dopamina y la Noradrenalina que están relacionados con la angustia, la ansiedad, miedo, agresividad así como los problemas alimentarios.

La Serotonina es producida a partir del aminoácido Triptófano, el cual es transportado a través de la barrera hematoencefalica hasta las neuronas por el gran transportador neutral de aminoácidos, LNAA. El LNAA también mueve otros aminoácidos como Tirosina, Valina a través de la barrera hematoencefalica. El Triptófano debe competir con estos aminoácidos para el transporte en el cerebro. Por lo tanto, la cantidad de Triptófano transportado depende tanto de su concentración como de la concentración de los otros aminoácidos en el cuerpo. Los bajos niveles de Serotonina explican en parte los problemas de las personas para dormir. Y están asociados a problemas de agresión, depresión, ansiedad e incluso a las migrañas.

La Serotonina o 5-hidroxitriptamina se encuentra en muchas células nerviosas del tronco cerebral y transfiere información por una vasta red de neuronas que regula muchas funciones orgánicas, incluyendo las emociones y los patrones del apetito y el sueño. La Serotonina, en niveles normales, tiene una influencia calmante estabilizando cuerpo y mente, lo cual evita que una persona se descontrole desmedidamente por situaciones estresantes, Ortiz, 2007, pág. 79.

Se estima que solamente 1 a 2% del total de la concentración de Serotonina se encuentra en el cerebro. Gran parte de la Serotonina se encuentra por fuera del sistema nervioso central, en las plaquetas y los mastocitos, Toro, 2010, pág. 30. Quienes presentan bajos niveles de Serotonina experimentan diversos grados de obsesión, angustia

y depresión. El Triptófano es un aminoácido básico para producir la Serotonina; por eso, los hidratos de carbono contenidos en las pastas, el pan y otros alimentos son recomendables para mejorar los niveles de Serotonina, porque los hidratos de carbono aumentan las concentraciones de Triptófano en el cerebro, Toro, 2010, pág. 30.

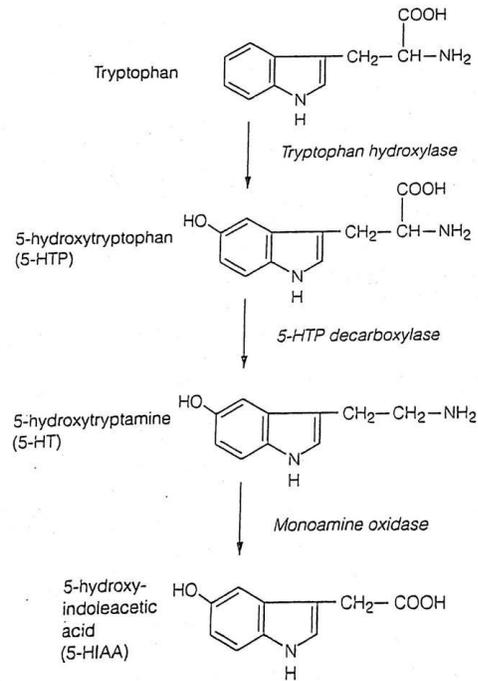


Fig. 8. Síntesis de la Serotonina.

II. 4 El Benceno

El Benceno, compuesto base de una gran familia de sustancias orgánicas, fue descubierto por Michael Faraday en 1826. Durante más de 40 años, los químicos estuvieron preocupados por encontrar su estructura molecular. Hacia 1865, August Kekulé dedujo que la mejor representación de la molécula del Benceno podría ser una estructura anular, es decir, un compuesto cíclico que consta de seis átomos de carbono:

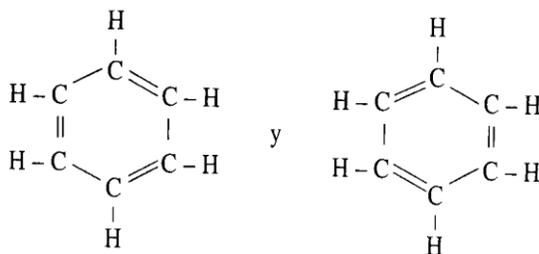


Fig. 9. Estructura del Benceno

La mejor manera de representar las propiedades del Benceno es mediante las dos estructuras resonantes anteriores. De manera alternativa, las propiedades del Benceno se explican en términos de orbitales moleculares deslocalizados, Chang pág. 1039. 10ª. Edición. Actualmente se utiliza el vocablo aromático para referirse al Benceno y los compuestos relacionados estructuralmente al mismo. Una representación de los orbitales del Benceno hace clara la conjugación cíclica de la molécula con la forma de un hexágono regular. Todos los ángulos de valencia C-C-C son de 120 grados, los seis átomos de carbono tienen hibridación sp^2 , y cada carbono tiene un orbital p perpendicular al lado del anillo de seis miembros.

Como los seis átomos de carbono y los seis orbitales p son equivalentes, es imposible definir tres enlaces pi localizados, en los cuales un orbital p dado solo se traslapa con el orbital p vecino. Más bien, cada orbital p se traslapa igualmente bien con ambos orbitales p vecinos, lo que lleva a una representación en que los seis electrones pi están deslocalizados por completo alrededor del anillo.

Se pueden construir los orbitales moleculares pi para el Benceno como se hace para el Butadieno. Si se combinan seis orbitales atómicos p en forma cíclica, resultan seis

orbitales moleculares. Los tres orbitales moleculares de baja energía ψ_1 , ψ_2 y ψ_3 , son combinaciones enlazantes y los tres orbitales de alta energía son de anti enlace. Dos de los orbitales de enlace, ψ_2 y ψ_3 , tienen la misma energía, al igual que los orbitales de anti enlace ψ_4^* y ψ_5^* . Cuando esto ocurre se dice que los orbitales están degenerados. También, dos de los orbitales, ψ_3 y ψ_4^* tienen nodos que cruzan dos de los átomos de carbono del anillo, con lo que no dejan densidad de electrones pi en estos carbonos. Los seis electrones p del Benceno ocupan los tres orbitales moleculares de enlace y están deslocalizados sobre el sistema conjugado. Esto produce la estabilización del Benceno.

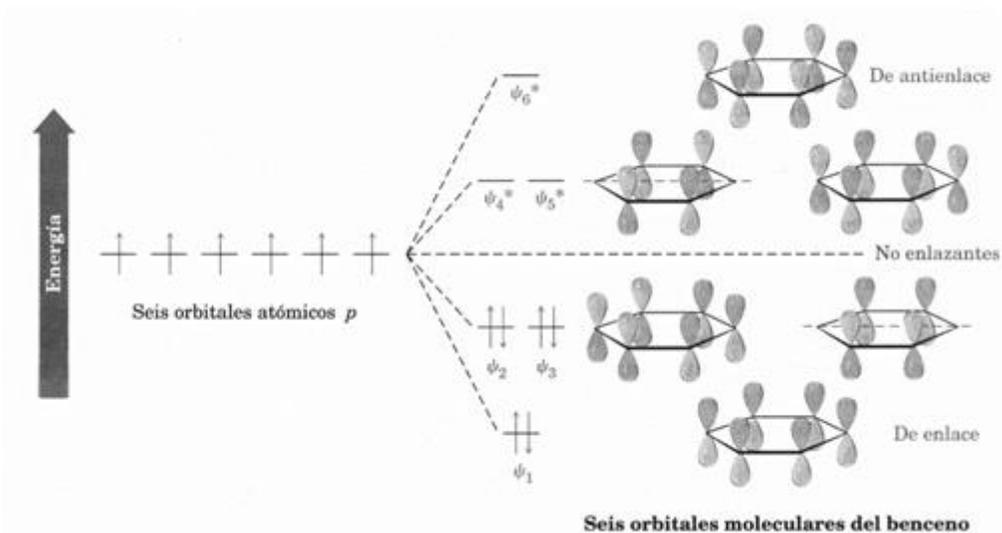


Fig. 10. Orbitales P del Benceno.

Cuando se calculan los niveles de energía de los orbitales moleculares, OM para las moléculas conjugadas cíclicas, el resultado es que siempre hay un OM único que queda abajo, sobre el cual los orbitales moleculares se acomodan en pares degenerados. Así, cuando los electrones llenan los diversos orbitales moleculares, se necesitan: dos, un par, para llenar el orbital que está en el nivel inferior y cuatro, dos pares, para cada uno de los n niveles sucesivos de energía, un total de $4n+2$. Cualquier otro número dejará un nivel de energía semilleno.

Los seis orbitales moleculares pi del Benceno que se mostraron en la figura 10 y sus energías relativas se muestran en la figura 11 nuevamente. Los siguientes dos orbitales con menor energía, ψ_2 y ψ_3 , están degenerados, por lo que se requieren cuatro

electrones para llenarlos. El resultado es una molécula aromática estable con seis electrones π con los orbitales de enlace llenos.

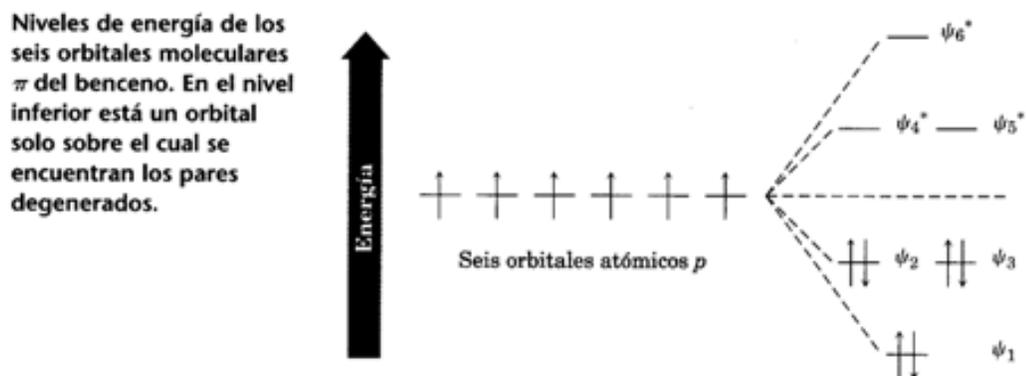


Fig. 11. Niveles de Energía de OM del Benceno descritos. Los orbitales segundo, tercero, cuarto y quinto son degenerados.

II.5 Aproximaciones de Huckel

De los métodos de la Química Cuántica que se aplican al estudio de moléculas orgánicas no saturadas, el de Erich Huckel es uno de los más populares, debido a su gran simplicidad, lo que permite incluso hacer cálculos a mano. Cuando el número de átomos es mayor de tres o cuatro, los cálculos se hacen más tediosos, a menos que la simetría de la molécula permita alguna simplificación; es por ello que se hace necesario usar un programa de computadora. Este método es considerado una de las aproximaciones más simples que hay en la teoría de los orbitales moleculares. Fue propuesto en el año 1930. Su aplicación está restringida al tratamiento de sistemas de hidrocarburos planos con enlaces π conjugados como ocurre en el caso del Etileno, el Butadieno y el Benceno, y sólo es aplicable al estudio de aquellas propiedades que estén dominadas por los orbitales moleculares π .

El método Huckel relaciona la aromaticidad con el número de electrones delocalizados en orbitales sp^2 de una molécula orgánica plana y cíclica que tiene enlaces simples y enlaces dobles conjugados. La importancia de esta regla radica en la gran diferencia de estabilidad que hay entre los compuestos aromáticos, los no aromáticos y los antiaromáticos, de forma que se pueden hacer predicciones cualitativas sobre la estabilidad química de los diferentes compuestos de forma sencilla. Los diagramas de niveles de orbitales π de moléculas conjugadas pueden construirse con este método.

En general, la mayoría de las moléculas poliatómicas pueden ser pensadas como una colección de enlaces de dos electrones entre los pares de átomos. Las moléculas conjugadas de tienden a ser planas, de modo que se puedan colocar todos los átomos en el plano xy . Así, la molécula tendrá la simetría de reflexión sobre el eje de z :

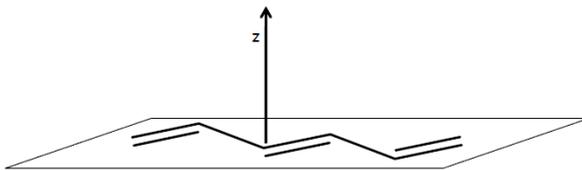


Fig. 12. Simetría de reflexión de una molécula conjugada respecto al eje Z .

Para sistemas planos conjugados los orbitales se separan en orbitales σ que están con respecto a la reflexión y los orbitales π_z que están desapareados con respecto a la reflexión en Z. Estos orbitales π_z serán combinaciones lineales de los orbitales p_z en cada átomo de carbón:

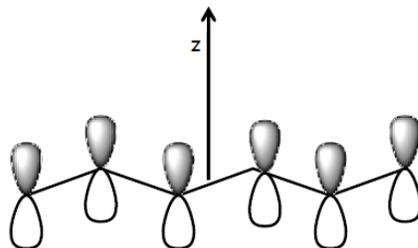


Fig. 13. Orbitales π_z en combinación con Orbitales p_z .

Para entender la química de estos compuestos, tiene sentido enfocar nuestra atención en los orbitales π_z e ignorar los orbitales σ . Los orbitales π_z terminan siendo los orbitales ocupados más altos, con los orbitales σ fuertemente enlazados. De este modo, la formación y ruptura de enlaces – implicada por las estructuras de resonancia– será más fácil si hablamos de hacer y romper enlaces π en vez de enlaces σ . Por consiguiente, podemos ignorar la existencia de los orbitales σ y trabajar solamente con los orbitales π en una teoría cualitativa de orbitales moleculares de sistemas conjugados. Este es el fundamento de la aproximación de Huckel que puede ser resumida en cinco pasos:

1) Definir los orbitales atómicos. Aquí, como solo interesa los orbitales π_z , será posible escribir los orbitales moleculares como combinaciones lineales de los orbitales p_z . Si asumimos que hay N átomos de carbono, cada uno constituye un orbital p_z y podemos escribir el orbital molecular μ como:

$$\pi^\mu = \sum_{i=1}^N c_i^\mu p_z^i \quad (1)$$

2) Hacer matrices representativas, matriz secular. Se deben hacer dos matrices, H y S que involucran integrales entre los orbitales p_z en los diferentes átomos de carbono:

$$H_{ij} = \int p_z^i \hat{H} p_z^j d\tau \quad S_{ij} = \int p_z^i p_z^j d\tau \quad (2)$$

La primera aproximación que se hace es que los orbitales pz son ortonormales. Esto significa que:

$$S_{ij} = \begin{cases} 1 & i = j \\ 0 & i \neq j \end{cases} \quad (3)$$

Igualmente, esto significa que S es la matriz identidad la cual reduce nuestro problema eigenvector o vectorpropio generalizado a un problema eigenvector normal.

$$\mathbf{H} \cdot \mathbf{c}^\alpha = E_\alpha \mathbf{S} \cdot \mathbf{c}^\alpha \quad \Rightarrow \quad \mathbf{H} \cdot \mathbf{c}^\mu = E_\mu \mathbf{c}^\mu \quad (4)$$

La segunda aproximación que se hace es asumir que cualquier integral hamiltoniana desaparece si se implican átomos i,j que no son vecinos cercanos. Esto tiene sentido porque, cuando los orbitales pz están lejanos tendrán muy poca espacio de solapamiento, que conduce a un integrando que es cercano a cero en todas partes. Notamos además que los términos diagonales, i=j, deben ser iguales porque ellos implican el promedio de energía de un electrón en un orbital pz de un carbono:

$$H_{ii} = \int p_z^i \hat{H} p_z^i d\tau \equiv \alpha \quad (5)$$

Al describir la energía de un electrón en un solo carbono, α es usualmente llamada energía in situ o local. Entre tanto, para dos vecinos "neighbors" cercanos cualesquiera, la matriz elemento será asumida como constante:

$$H_{ij} = \int p_z^i \hat{H} p_z^j d\tau \equiv \beta \quad i,j \text{ neighbors} \quad (6)$$

Esta aproximación es buena mientras las longitudes de los enlaces C-C en la molécula sean parecidas. Si hay una alteración de longitud de enlace insignificante, entonces esta aproximación puede permitir β dependiendo de la distancia del enlace C-C.

Como veremos, β nos permite describir la deslocalización del electrón que viene de estructuras de múltiple resonancia y además es también llamada integral de resonancia.

Se debaten aun los valores correctos para los parámetros α , β pero los valores aproximados mas aceptados son $\alpha=11.2$ eV y $\beta=.7$ eV.

3) Lo que sigue es resolver el problema eigenvector. En esta parte casi siempre se usa una computadora. Pero como las matrices son muy simples se pueden encontrar estos valores de manera rápida.

4) En esta etapa, haciendo un diagrama de orbitales, notamos que de nuestros N orbitales pz vamos a obtener N orbitales π . Además, cada carbono tiene un electrón de valencia libre a contribuir para un total de N electrones que necesitaran ser contabilizados, asumiendo que la molécula es neutra. Haciendo la contabilización para el espín, habrán N/2 orbitales moleculares ocupados y N/2 no ocupados. Para el estado basal, serán por supuesto ocupados los orbitales de menor energía.

5) Para el cálculo de la energía, siendo una forma muy aproximada a la teoría de orbitales moleculares, Huckel usa la expresión de energía de los electrones que no interactúan:

$$E_{tot} = \sum_{i=1}^N E_i \quad (7)$$

Donde E_i son los eigenvectores de los orbitales moleculares determinados en el tercer paso. Para ilustrar un ejemplo de Huckel, se muestra a continuación el cálculo de la energía para el benceno, denominando las ecuaciones del ejemplo como ‘‘EEJ’’.

- a. Cada uno de los orbitales moleculares, OM, del Benceno es una combinación lineal de seis orbitales pz.

$$\psi^\mu = \sum_{i=1}^6 c_i^\mu p_z^i \quad \rightarrow \quad \mathbf{c}^\mu = \begin{pmatrix} c_1^\mu \\ c_2^\mu \\ c_3^\mu \\ c_4^\mu \\ c_5^\mu \\ c_6^\mu \end{pmatrix}$$

EEJ.1

- b. Es relativamente fácil trabajar el Hamiltoniano haciendo una matriz 6x6. La primera regla implica que cada elemento diagonal es α :

$$\mathbf{H} = \begin{pmatrix} \alpha & & & & & \\ & \alpha & & & & \\ & & \alpha & & & \\ & & & \alpha & & \\ & & & & \alpha & \\ & & & & & \alpha \end{pmatrix}$$

EEJ. 2

Los únicos otros términos no iguales a cero estarán entre los vecinos: 1-2, 2-3, 3-4, 4-5, 5-6 and 6-1. Todos estos elementos son iguales a β :

$$\mathbf{H} = \begin{pmatrix} \alpha & \beta & & & & \beta \\ \beta & \alpha & \beta & & & \\ & \beta & \alpha & \beta & & \\ & & \beta & \alpha & \beta & \\ & & & \beta & \alpha & \beta \\ \beta & & & & \beta & \alpha \end{pmatrix}$$

EEJ. 3

El resto de elementos implican vecinos no cercanos y entonces son cero:

$$\mathbf{H} = \begin{pmatrix} \alpha & \beta & 0 & 0 & 0 & \beta \\ \beta & \alpha & \beta & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \beta & \alpha & \beta & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \beta & \alpha & \beta & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \beta & \alpha & \beta \\ \beta & 0 & 0 & 0 & \beta & \alpha \end{pmatrix}$$

EEJ. 4

- c. Encontrar los eigenvectores de \mathbf{H} se realiza sencillo con una computadora. Se encuentran cuatro energía distintas:

$$\begin{array}{l} E_6 = \alpha - 2\beta \quad \text{—————} \\ E_4 = E_5 = \alpha - \beta \quad \text{—————} \quad \text{—————} \\ \dots\dots\dots \\ E_2 = E_3 = \alpha + \beta \quad \text{—————} \quad \text{—————} \\ E_1 = \alpha + 2\beta \quad \text{—————} \end{array}$$

Fig. 14a. Energías de los orbitales moleculares del Benceno determinadas por aproximaciones de Huckel.

Las energías más altas y bajas son no degeneradas. La segunda/tercera y cuarta/quinta energías son degeneradas una con la otra. Con un poco más de trabajo se pueden obtener los eigenvectores. Estos son:

$$\begin{aligned}
 \mathbf{c}^6 &= \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{pmatrix} +1 \\ -1 \\ +1 \\ -1 \\ +1 \\ -1 \end{pmatrix} &
 \mathbf{c}^5 &= \frac{1}{\sqrt{12}} \begin{pmatrix} +1 \\ -2 \\ +1 \\ +1 \\ -2 \\ +1 \end{pmatrix} &
 \mathbf{c}^4 &= \frac{1}{\sqrt{4}} \begin{pmatrix} +1 \\ 0 \\ -1 \\ +1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix} &
 \mathbf{c}^3 &= \frac{1}{\sqrt{4}} \begin{pmatrix} +1 \\ 0 \\ -1 \\ -1 \\ 0 \\ +1 \end{pmatrix} &
 \mathbf{c}^2 &= \frac{1}{\sqrt{12}} \begin{pmatrix} +1 \\ +2 \\ +1 \\ -1 \\ -2 \\ -1 \end{pmatrix} &
 \mathbf{c}^1 &= \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{pmatrix} +1 \\ +1 \\ +1 \\ +1 \\ +1 \\ +1 \end{pmatrix}
 \end{aligned}$$

EEJ. 5

d. Hay seis electrones π en el benceno, por eso ocupamos doblemente los primeros tres orbitales moleculares:

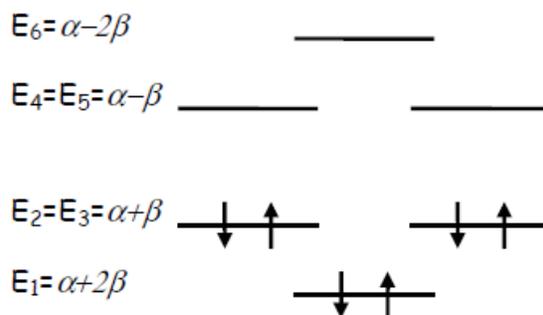


Fig. 14b. Energías de los orbitales moleculares del Benceno determinadas por aproximaciones de Huckel. Visualización de los electrones π ocupando doblemente los primeros tres orbitales moleculares

e. La energía Huckel del Benceno es entonces:

$$E = 2E_1 + 2E_2 + 2E_3 = 6\alpha + 8\beta$$

EEJ.6

Notamos que el Benceno es de alguna manera más estable que muchos sistemas típicos con tres dobles enlace. Si realizamos la teoría de Huckel para el Etileno, encontramos que un único enlace doble del mismo tiene una energía: $E_{C=C} = 2\alpha + 2\beta$.

Así, si el Benceno tiene simplemente tres dobles enlace, esperaríamos tener una energía total de: $E = 3E_{C=C} = 6\alpha + 6\beta$ que está fuera por 2β . Se debe recalcar que β es negativo, por ende los electrones π en el Benceno son más estables que una colección de tres dobles enlaces. A esto se le llama estabilización aromática, y la teoría de Huckel predice una estabilización similar de otros sistemas conjugados con $4N+2$ electrones. Ejemplos de cálculos de Huckel en Etileno y Butadieno: *Ver Anexo III*.

II. 6 Aplicación de las aproximaciones de Huckel al Sistema nervioso: La simetría funcional cerebral

Un modelo simétrico basado en la simetría orbital molecular de neurotransmisores y su interacción con el efecto de canalización de iones se propone condiciones de liderazgo y de gestión y cómo se pueden utilizar para los recursos humanos, la gestión y el desarrollo del liderazgo en las organizaciones. Los efectos iónicos de canalización e interacciones de neurotransmisores del impulso eléctrico y la concentración de químico en la superficie del cuerpo celular en el flujo neuronal son bien conocidos. La velocidad y la excitabilidad de los neurotransmisores son la dependencia química y la temperatura. Además, la imaginación de resonancia magnética nuclear y espectroscopia de otro cerebro similares se han utilizado para identificar las funciones del cerebro y de las interacciones.

Se ha utilizado la combinación matemática como se describe por los coeficientes de las densidades electrónicas en técnica de resonancia de espín electrónico y el efecto del equilibrio dinámico de par iónico que tiene dos estados al mismo tiempo. Los neurotransmisores son moléculas compuestas por átomos de nitrógeno, oxígeno y de carbono, en su mayoría de péptido similar. Con el fin de hacer la comparación se ha usado el sistema de orbitales moleculares del Butadieno, que es un conjugado lineal con cuatro átomos de carbono, se forma el sistema deslocalizado, OM simple.

El modelo del Butadieno tiene cuatro niveles de energía con cuatro átomos o unidades. Los primeros dos niveles o orbitales son llamados unión y los dos últimos orbitales antiunión, los orbitales HOMO y LUMO son el segundo y tercero respectivamente. La simetría de estos orbitales no cambia con el incremento de la conjugación. Cada nivel de energía se caracteriza por su función de onda, la simetría y la densidad electrónica de los coeficientes de las funciones de onda de los orbitales. Se encontró que los individuos que indicaban menos influencias de calor fueron aquellos cuyo sistema se parecía al de la energía LUMO y simetría permitida. Este experimento muestra que este fenómeno está también relacionada con la simetría y las condiciones de coordinación del pensamiento, Concepción, 2006. *Ver Anexo IV.*

II.7 El efecto inductivo

Las diferentes electronegatividades de los átomos que constituyen las moléculas orgánicas, y las interacciones secundarias entre sus orbitales, provocan la aparición de ciertos efectos de polarización y deslocalización electrónica. Uno de ellos es el efecto inductivo que se puede definir como la polarización de un enlace provocada por un átomo o un grupo atómico a lo largo de una cadena carbonada. El efecto inductivo es permanente y por tanto no es un fenómeno que ocurra en un momento dado en la molécula. Hay que tener en cuenta que el efecto inductivo decrece rápidamente al aumentar la distancia al origen del desplazamiento electrónico, y en la práctica se puede despreciar a partir del segundo átomo de la cadena. El efecto inductivo no supone deslocalización de la densidad electrónica sino simplemente acercamiento de ésta a uno de los átomos, quedando los electrones en su orbital.

El efecto inductivo puede ser electrón-atrayente, o electrón-donante. El efecto inductivo se representa transformando el enlace en una flecha y se indica como +I o -I, según el efecto sea electrón-donante o electrón-atrayente. Tomando como referencia el H, cuyo efecto inductivo se considera cero, aquellos átomos, o grupos de átomos, cuya electronegatividad es mayor que la del C tienen efecto inductivo -I. Este tipo de átomos, o grupos de átomos, se clasifican como electrón-atrayentes, ya que atraen hacia sí el par de electrones del enlace dejando sobre el átomo de carbono al que están unidos una densidad de carga positiva.

Por otro lado, aquellos átomos o grupos de átomos, que tienden a desplazar la densidad electrónica sobre el átomo de carbono al que están unidos se dice que tienen un efecto inductivo +I, y se clasifican como grupos electrón-dadores. En este grupo se incluyen los radicales alquílicos, los metales, y los grupos cargados negativamente.

TABLA 2

UNA CLASIFICACIÓN DE LOS PRINCIPALES GRUPOS ORGÁNICOS SEGÚN SUS EFECTOS INDUCTIVOS ELECTRÓN-ATRAYENTES O ELECTRÓN-DADORES

Efecto inductivo de varios grupos funcionales*			
+I	-I		
-O [⊖]	-NR ₃ [⊕]	-COOH	-OR
-COO [⊖]	-SR ₂ [⊖]	-F	-C(=O)R
-CR ₃	-NH ₃ [⊕]	-Cl	-SH
-CHR ₂	-NO ₂	-Br	-SR
-CH ₂ R	-SO ₂ R	-I	-OH
-CH ₃	-CN	-OAr	-C=CR
-D	-SO ₂ Ar	-COOR	-CH=CR ₂

* Comparados con el H. Los grupos están en orden decreciente de atracción o repulsión (grupos -I o +I).

Hammet definió una constante del sustituyente X, σ_x , que mide el efecto electrónico de un sustituyente, atrayente o dador de electrones.

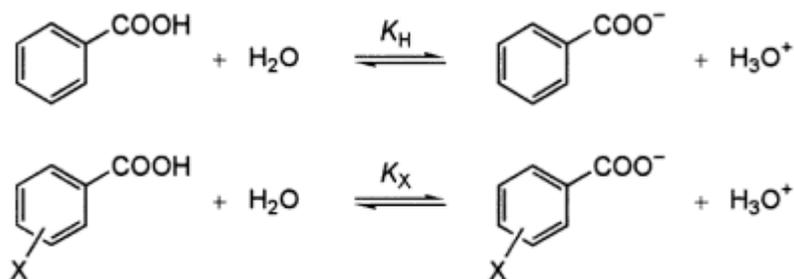


Fig. 15. Relaciones de Hammet. Disociación del Acido Benzoico, donde K_H es la constante de equilibrio del compuesto sin sustituir, ácido benzoico y K_x la constante de equilibrio.

De acuerdo con la ecuación:

$$\sigma_X = \log \frac{K_X}{K_H} = pK_{a(H)} - pK_{a(X)}$$

$\sigma_X > 0$: atrayentes de electrones

$\sigma_X < 0$: dadores de electrones

(8)

Los sustituyentes a electro atrayentes tienen valores de σ_x positivos dado que desplazan el equilibrio hacia la derecha. Los electro donantes tienen valores negativos por el efecto contrario.

Una de las ventajas del empleo de estas constantes σ_x de Hammet es la facilidad con que puede hacerse una estimación tanto de su signo como de su valor teniendo en cuenta los efectos electrónicos de un sustituyente considerado. Se debe tener en cuenta la posición relativa del sustituyente al grupo que experimenta el efecto.

TABLA 3

VALORES DE SIGMA PARA ALGUNOS SUSTITUYENTES

Sustituyente	σ_m	σ_p	Sustituyente	σ_m	σ_p
H	0,00	0,00	CN	0,56	0,66
Br	0,39	0,23	CO ₂ ⁻	-0,10	0,00
Cl	0,37	0,23	CHO	0,35	0,42
F	0,34	0,06	CO ₂ H	0,37	0,45
I	0,35	0,18	CF ₃	0,43	0,54
NO ₂	0,71	0,78	C=O(NH ₂)	0,28	0,36
NH ₂	-0,16	-0,66	CH ₃	-0,07	-0,17
NH ₃ ⁺	0,86	0,60	CH ₂ OH	0,00	0,00
O ⁻	-0,47	-0,81	COCH ₃	0,38	0,50
OH	0,12	-0,37	C=O(OEt)	0,37	0,45
OCH ₃	0,12	-0,27	C(CH ₃) ₃	-0,10	-0,20
OC=O(CH ₃)	0,39	0,31	C ₆ H ₅	0,06	-0,01

II.8 Los niveles de energía del cerebro

El cerebro produce impulsos eléctricos, potenciales de acción, que se transportan a través de las neuronas. Estos impulsos eléctricos producen ritmos que son conocidos como las ondas cerebrales. Los impulsos eléctricos son informaciones que viajan de neurona a neurona haciendo uso de cientos de miles de las mismas para lograr transportarse y ejecutar una función determinada. La actividad de las ondas cerebrales puede ser observada un electroencefalograma.

En los niveles de energía del cerebro se incluyen los siguientes:

Alfa: las ondas cerebrales alfa están presentes en una profunda relajación con los ojos cerrados y por lo general, mientras se sueña despierto. Alfa aumenta la imaginación, la visualización, la memoria, el aprendizaje y la concentración. Se encuentra en la base de su conocimiento consciente y es la puerta de entrada a la mente subconsciente.

El ritmo alfa desaparece bajo la influencia de una excitación sensorial o de un esfuerzo intelectual; así, al abrir los ojos, el ritmo alfa desaparece constituyendo la llamada reacción de "bloqueo" o "reacción de paro". El neurotransmisor activo principalmente es la Dopamina.

Beta: las ondas cerebrales beta se asocian con la conciencia normal de vigilia y un mayor estado de alerta, la lógica y el razonamiento crítico. Aunque importante para que funcione eficazmente en la vida cotidiana, los niveles de beta más altos se traducen en estrés, ansiedad e inquietud. El ritmo beta, más irregular que el alfa, se encuentra sobre las áreas frontales y temporales. En muchos individuos normales con poca actividad alfa, el ritmo beta es generalizado.

Theta: las ondas cerebrales theta están presentes durante la meditación profunda y sueño ligero. Visualizaciones vívidas, gran inspiración profunda, creatividad, la perspicacia excepcional, así como la mayoría de los programas profundos de la mente están todos en Theta. La Serotonina es el principal neurotransmisor activo.

Delta: Esta presente en el sueño profundo sin sueños y la meditación trascendental. El ritmo delta debe ser de muy bajo voltaje, nunca aparecer en forma de descargas.

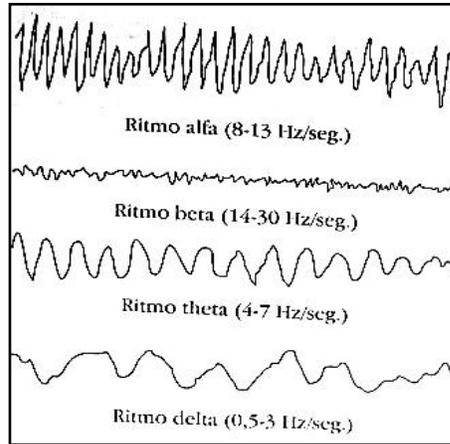
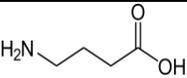
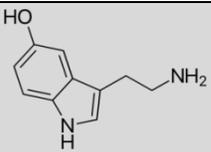
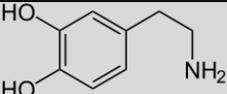
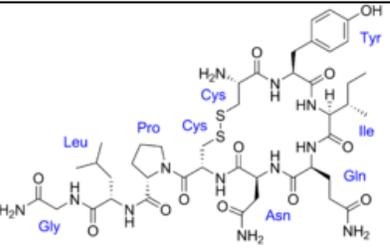


Fig. 16. Ritmos eléctricos en los niveles del cerebro.

Cada estado de sueño o vigilia que experimentamos, seamos conscientes de ello o no, es la combinación de una o varias de las principales ondas cerebrales: beta, alfa, theta y delta. Cada uno de nosotros tiene un patrón o perfil de ondas determinado que observado al detalle es tan personal como nuestra huella dactilar. Nuestro cerebro produce impulsos eléctricos a cada instante. Esta corriente de electricidad, u ondas cerebrales se mide de dos formas: amplitud y frecuencia. La amplitud es el poder del impulso eléctrico, medido en micro voltios. Y la frecuencia es la velocidad de la emisión eléctrica medida en hercios. La frecuencia determina la categoría de la onda cerebral: beta, alfa, teta o delta. La categoría o combinación de categorías determina nuestro estado psicológico interno. Beta, alfa, theta y delta son los ladrillos de la consciencia humana.

TABLA 4

NEUROTRANSMISORES EN LOS DISTINTOS NIVELES DEL CEREBRO

Neurotransmisores	Estructuras	Niveles cerebrales	Ondas Cerebrales
GABA		I	Delta 1 Hz- 4 Hz
Serotonina		II	Theta 4 Hz- 8 Hz
Dopamina		III	Alfa 9 Hz- 14 Hz
Oxitocina		IV	Beta 15 Hz- 30 Hz

Fuente: Concepción, 2015.

II. 9 Desarrollo de un modelo relacionando los niveles de energía del cerebro y el benceno

En el cerebro, el Benceno tiene una función estelar a nivel de neurotransmisores. Al hacer uso de los conocimientos de la mecánica cuántica relacionada con la molécula de benceno permite la presentación de una forma elegante para explicar el nivel energético de sus orbitales en función del efecto inductivo de los sustituyentes que se pueden observar en los derivados del Benceno.

El Benceno es una creación maravillosa: plano, compacto, simétrico, y de una estabilidad que sirve como modelo para toda una clase de moléculas orgánicas, Morrison & Boyd, 1989. Los neurotransmisores más importantes a nivel cerebral poseen un anillo de Benceno en su estructura por eso, es de gran importancia estudiar lo mágico del Benceno en su acción en el cerebro.

En este trabajo de grado el enfoque principal es hacia el segundo y tercer nivel del cerebro, por lo que aquí se presentan las posiciones y características inductivas de los sustituyentes para explicar su influencia en el segundo y tercer nivel energético del cerebro, el theta y el alfa, en donde actúan la Serotonina y la Dopamina.

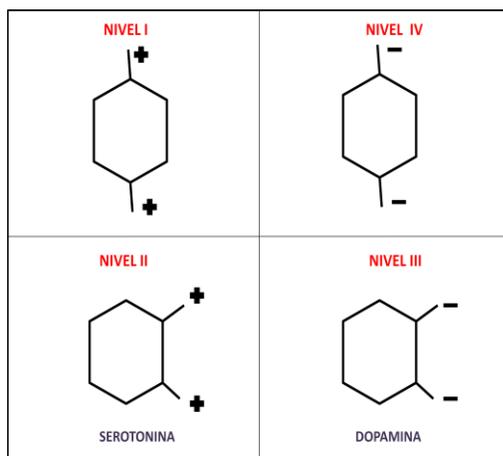


Fig. 17. Modelo que relaciona los niveles de energía del cerebro con neuromoléculas poseedoras de un anillo Benceno.

II.9.1 Desarrollo del Modelo: Los Niveles De Energía De Benceno

Como se vio en la sección II.4 el Benceno posee seis orbitales moleculares pi que se mostraron en la figura 10 y cuyas energías relativas se mostraron en la figura 11. Dos de los orbitales de enlace, ψ_2 y ψ_3 , tienen la misma energía, al igual que los orbitales de anti enlace ψ_4^* y ψ_5^* , es decir, son degenerados. Los orbitales cuarto y quinto en el Benceno también son denominados asimétrico y simétrico, como se muestra en la figura 18.

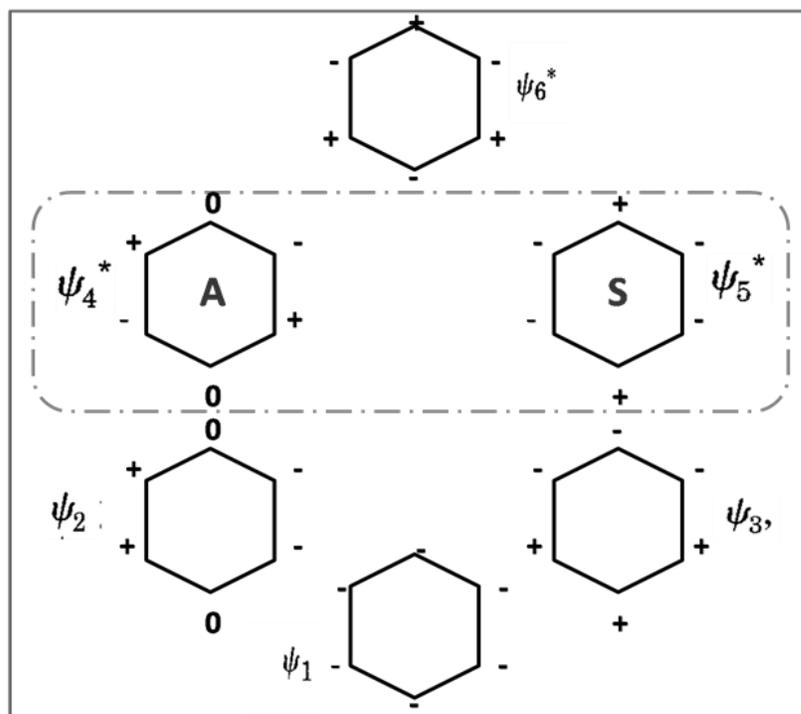


Fig. 18. Niveles Energéticos del Benceno.

Estos dos orbitales para los fines de este estudio marcan una gran importancia. Primero, porque cuando el benceno pasa por la acción de efectos inductivos, estos dos orbitales hacen transiciones dependiendo si el efecto mencionado es electrodonante o

electroatrayente. En segundo lugar, porque ambos son los orbitales moleculares más cercanos desocupados.

II.9.2 Niveles I y IV del cerebro

La explicación del nivel energético de los orbitales de los derivados del Benceno debido al efecto inductivo de los sustituyentes en posición para es asociado a la función analgésica y eufórica en el cerebro en donde se presentan los niveles delta y beta.

Los trabajos asociados a estos dos niveles comienzan con el estudio de la resonancia spin electrónica de la 1,4-benzoquinona, la cual ha sido precursora de diversos narcóticos. Cuando en una molécula o ión hay un electrón no compensado permite la aparición de niveles energéticos, que surgen de la interacción del momento magnético del electrón con un campo magnético externo aplicado. El momento magnético spin electrónico es unas mil veces mayor que cualquier momento magnético nuclear típico. En 1982 Jesús Gilberto Concepción realizó un estudio con el anión radical de la Benzoquinona y un sustituyente donde analizó la misma mediante la resonancia spin electrónica y cálculos de Huckel. *Ver Anexo VI. Gráfico A.*

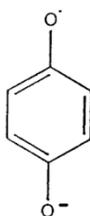


Fig. 19. Anión Radical Libre de la Benzoquinona.

Para un anión radical libre como el de la figura anterior el electrón no compensado puede desplazarse por toda la molécula y experimentar el efecto de los momentos de los núcleos de los cuatro hidrógenos equivalentes dando origen a escisiones de nivel de energía. La espectroscopia de resonancia spin electrónica es una poderosa herramienta para el estudio de las especies químicas con electrones no compensados, como las de tipo ión radical.

Desde 2006 Jesús Gilberto Concepción comienza hablar de la simetría cerebral e inicia el desarrollo del modelo para el Benceno sustituido en posición para. Observó que

el efecto inductivo tanto electro donante como electro atrayente en dichas posiciones presentaba gran variación respecto a la energía de los Orbitales HOMO-LUMO.

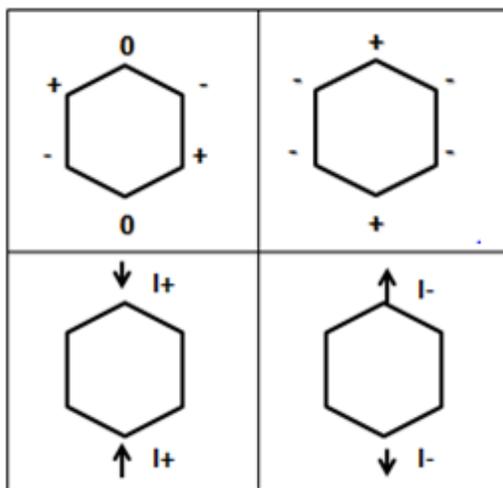


Fig. 20. Asociando el nivel de energía del cuarto orbital molecular del Benceno para el modelo de los niveles I y IV.

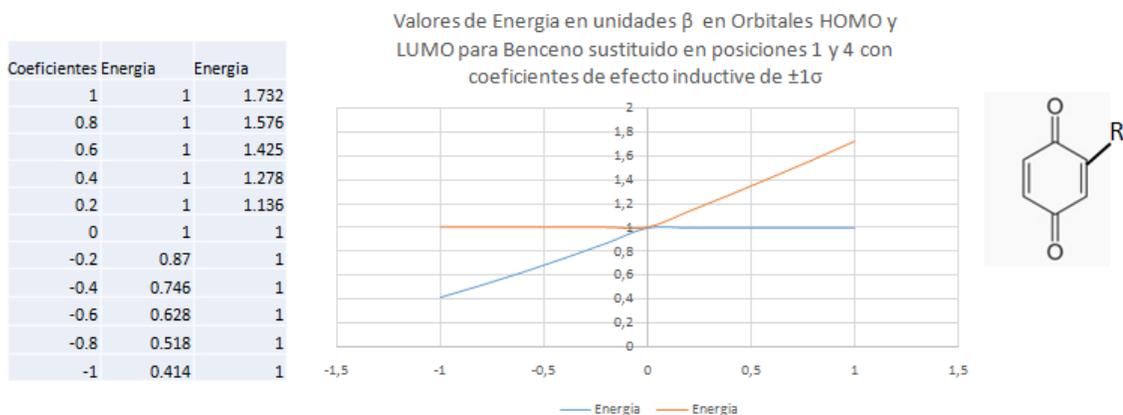


Fig. 21. Primer gráfico realizado por J. G. Concepción para el Benceno sustituido en posición 1,4 con el anión radical de Benzoquinona para el análisis de los valores de variación en energía entre los orbitales HOMO y LUMO, encontrando una relación directa entre la variación en energía de estos orbitales con los efectos inductivos de los sustituyentes. Ya para los años 70 Concepción y Stevenson publicaron sobre estos fenómenos utilizando la molécula de Ciclooctatetraeno.

I.9.3 Niveles II y III del cerebro

Ya presentado el modelo de los niveles I y IV, en esta oportunidad se muestra un mapa debido a las posiciones y características inductivas de los sustituyentes para explicar su influencia en el II y III nivel energético del cerebro, el theta y el alfa.

Hamerrof y Penrose en 2015 trabajaron la mecánica cuántica para los aminoácidos aromáticos presentes en los microtúbulos de las neuronas.

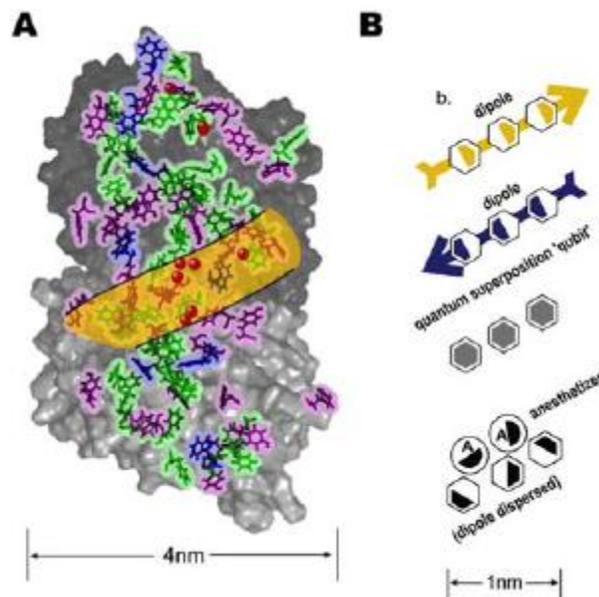


Fig. 22. Descripción de los microtúbulos neuronales con residuos de Tirosina, Fenilalanina y Triptófano.

Lucio Tonello en 2015 habla sobre el posible rol de la Serotonina en la consciencia asociándola a su comportamiento en ácidos grasos y comparando la estructura química de la Serotonina con la de su aminoácido precursor, el Triptófano.

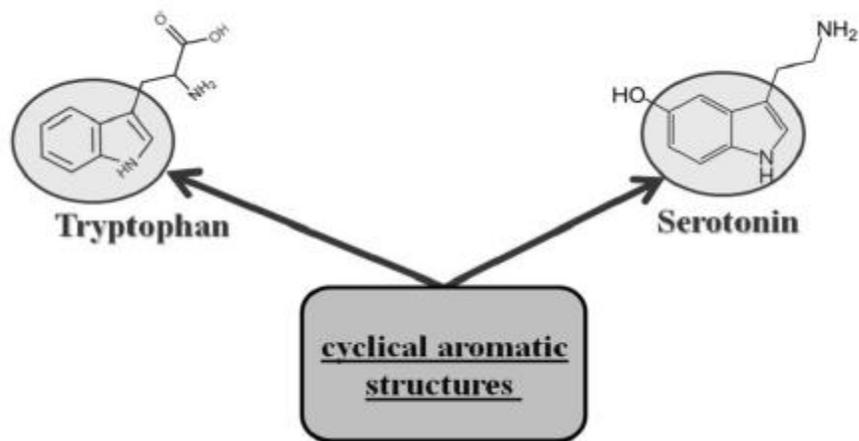


Fig. 23. Comparación de las estructuras de Serotonina y Triptófano.

Se propone relacionar las estructuras de la Serotonina, Dopamina y análogos para el desarrollo de un modelo cerebral basado en efectos inductivos para las posiciones orto en el Benceno, haciendo una simplificación estructural de los mencionados neurotransmisores para solo tener un enfoque directo en el anillo aromático.

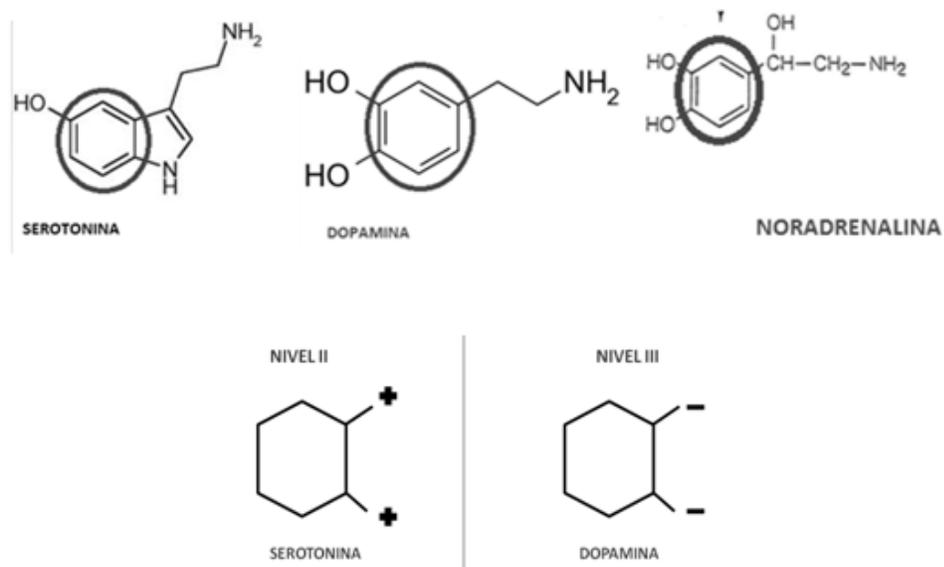


Fig. 24. Neurotransmisores con una estructura simplificada al Benceno sustituido.

En relación con los niveles de energía del Benceno, las estructuras simplificadas anteriores presentan semejanza al orbital quinto que se observó en la figura 18. De ahí se obtuvo que:

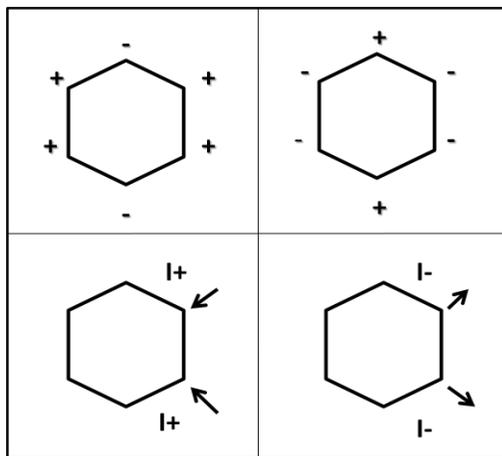


Fig. 25. Asociando las densidades electrónicas al nivel de energía del quinto orbital molecular del Benceno para el modelo de los niveles II y III.

SEGUNDA PARTE:
MÉTODO DE INVESTIGACIÓN

CAPÍTULO III: MÉTODO DE INVESTIGACIÓN

III 1. Selección de un programa de computadora para realizar cálculos de la aproximación de Huckel

Como se vio en el capítulo anterior, las aproximaciones de Huckel muestran una vía más simplificada para el cálculo de las energías de orbitales moleculares en moléculas conjugadas. Cuando el número de átomos es mayor de tres o cuatro, los cálculos tienden a ser más complicados, por lo que es necesario usar un programa de computadora que facilite el cálculo de orbitales moleculares de moléculas más extendidas. Para esos fines se utiliza un programa diseñado por el departamento de química de la Universidad de Calgary en Canadá, llamado SHMO, Simple Huckel Molecular Orbital calculator, el cual está disponible en línea sin costo alguno para instituciones educativas. *Ver Anexo V.*

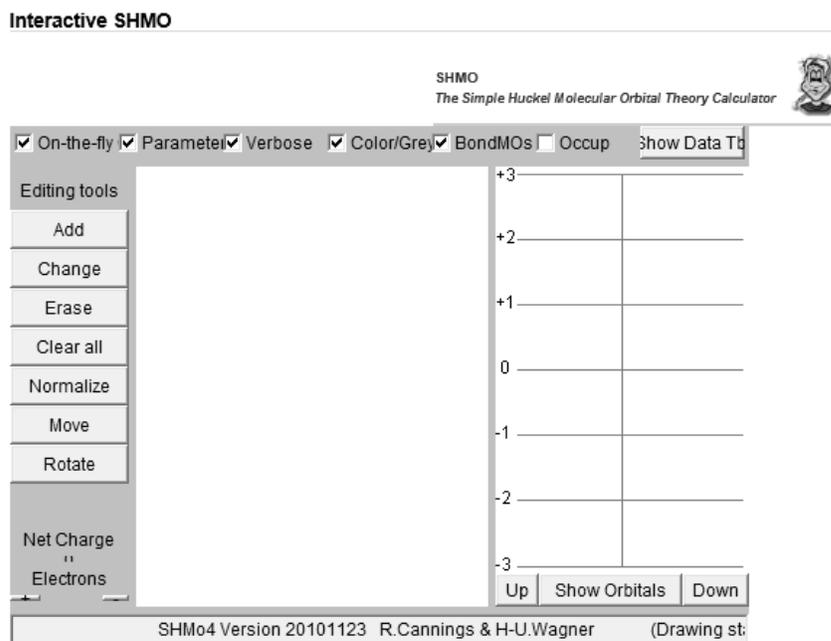


Fig. 26. Interfaz gráfica Programa SHMO.

III. 2 Uso del programa SHMO para calcular las energías de los orbitales moleculares degenerados cuarto y quinto del Benceno sustituido similares a los de neurotransmisores

Esta propuesta está basada en realizar los cálculos de energía de transición de los electrones del último nivel energético de los orbitales moleculares Benceno que guardan similitud con neurotransmisores de acción en el sistema nervioso, siguiendo estos pasos:

- Obtención la simetría de esas transiciones. La simetría de estos orbitales está asociada con el poder inductivo de los sustituyentes en posición 1,2 y 1,4 de Benceno. Se trabajan efectos inductivos tanto positivos como negativos en esas posiciones.
- Con los resultados se clasifica esa acción hacia los niveles de energía del cerebro.

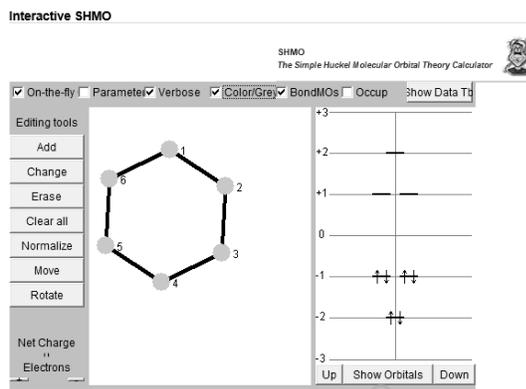


Fig. 27. Orbitales moleculares del Benceno en estado basal con SHMO.

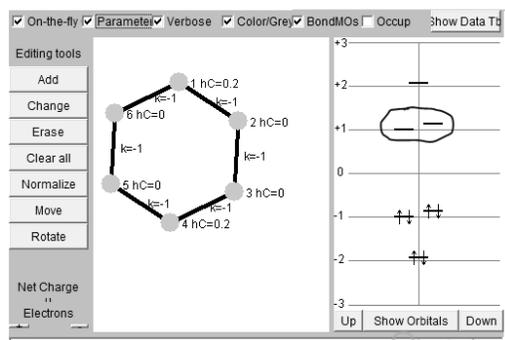


Fig. 28. Transición de los Orbitales simétrico y asimétrico por efecto inductivo positivo en las posiciones uno y cuatro del Benceno.

III.3 Observaciones en el transcurso de los cálculos en SHMO

A medida que se realizan las sustituciones en la estructura del Benceno en posiciones 1,4 y 1,2 con efectos inductivos tanto (+) como (-), se hacen observaciones en donde dicha estructura presenta estabilidad y en otras no dependiendo del grado de separación entre los orbitales. Mientras más separados están los orbitales más estable es el orbital donde queda el electrón excitado. Así mismo podemos decir que a mayor separación entre los orbitales cuando se sustituye el Benceno mayor energía.

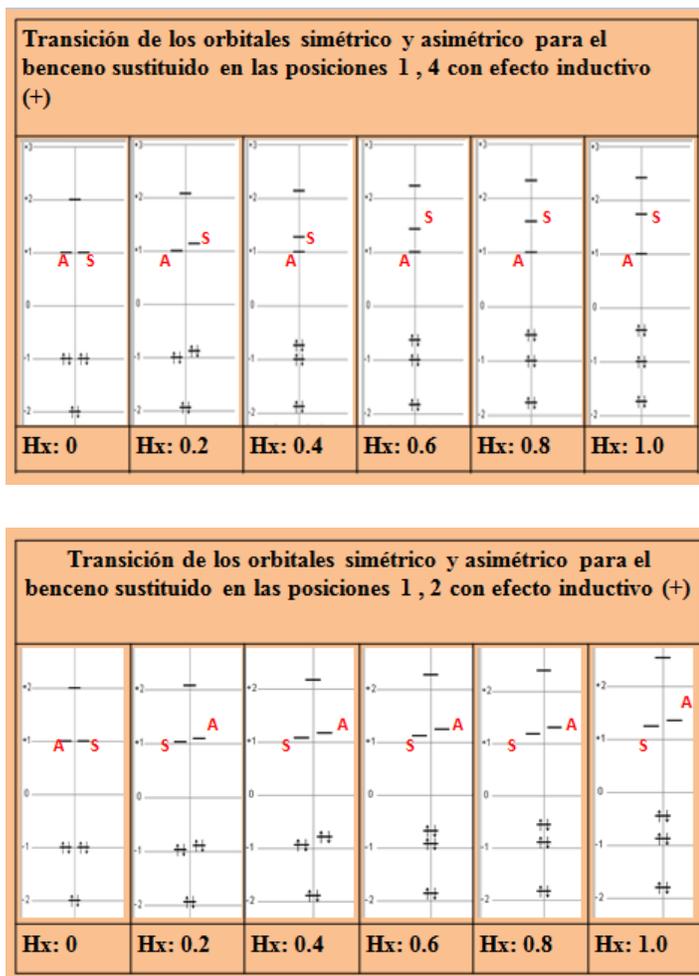


Fig. 29. Esquema comparativo en las transiciones de los orbitales asimétrico y simétrico del Benceno en función al efecto inductivo aplicado.

III.4 Realización de gráficos correspondientes al comportamiento de las energías de los orbitales moleculares cuarto y quinto del Benceno en función al efecto inductivo

Se utiliza Excel para el análisis de los datos arrojados por el programa SHMO mediante gráficas de los coeficientes de efecto inductivo $\pm 1\sigma$ versus la energía obtenida en los orbitales moleculares cuarto y quinto de la molécula del Benceno. Las figuras a continuación describen la secuencia de cómo fue realizado lo mencionado previamente para el caso del Benceno sustituido en posición 1,2. El mismo procedimiento fue realizado para las posiciones 1,4.

```
SHMO Data Table SHMo4 Version 20101123 R.Cannings & H-U.Wagner
Simple Hueckel Molecular Orbital Calculation - Data Table
SHMo4 Version 20101123 R.Cannings & H-U.Wagner
(ENTER DESCRIPTIVE TITLE HERE)
Number of Electrons = 6 Net Charge = 0
Total energy = 6 alpha -7.610 |beta|
Lowest Unoccupied MO = LUMO # 4 Energy: alpha + 1.036 |beta|
Highest Occupied MO = HOMO # 3 Energy: alpha -0.896 |beta|
Orbital Energies / Coefficients Table
-----
Orbital energies in units of |beta| relative to alpha
MO number  1  2  3  4  5  6
Occupancy  (2) (2) (2) (0) (0) (0)
Energy     -1.940 -0.969 -0.896 1.036 1.095 2.074
#
1 C  -0.364  0.269 -0.521 -0.311  0.471  0.454
2 C  -0.364 -0.269 -0.521 -0.311 -0.471 -0.454
3 C  -0.415 -0.583 -0.050  0.570 -0.050  0.397
4 C  -0.442 -0.296  0.476 -0.280  0.525 -0.369
5 C  -0.442  0.296  0.476 -0.280 -0.525  0.369
6 C  -0.415  0.583 -0.050  0.570  0.050 -0.397
```

Fig. 30a. Tabla de datos arrojada por SHMO para el Benceno con efecto inductivo $\sigma = .2$ en las posiciones (1,2): Se resaltan los valores de energía para los OM cuarto y quinto para ese caso.

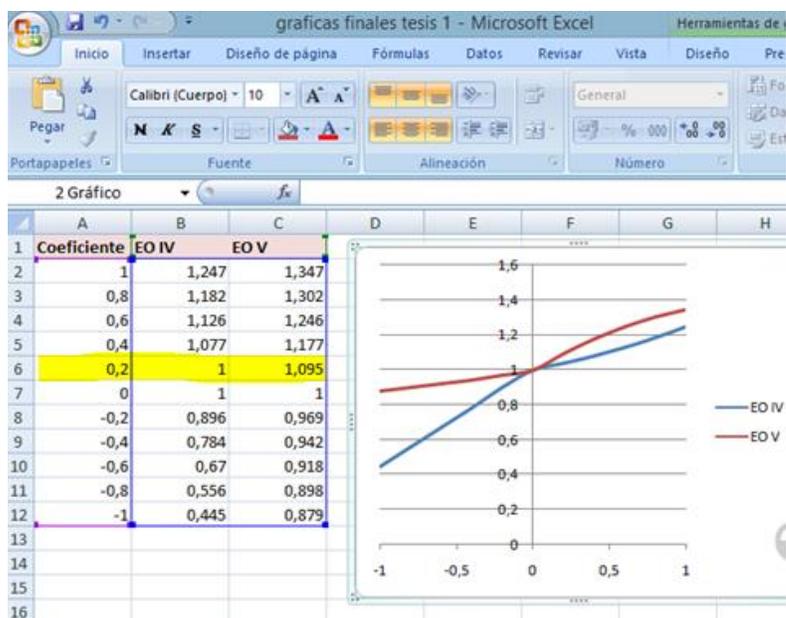


Fig. 30b. Vista del programa Excel usado como herramienta de trabajo para la construcción de las gráficas: Gráfica orbitales HOMO-LUMO del Benceno Vs. Efecto Inductivo $\pm 1\sigma$. Se resalta $\sigma = .2$ para explicar el uso de los valores obtenidos en Fig. 30a.

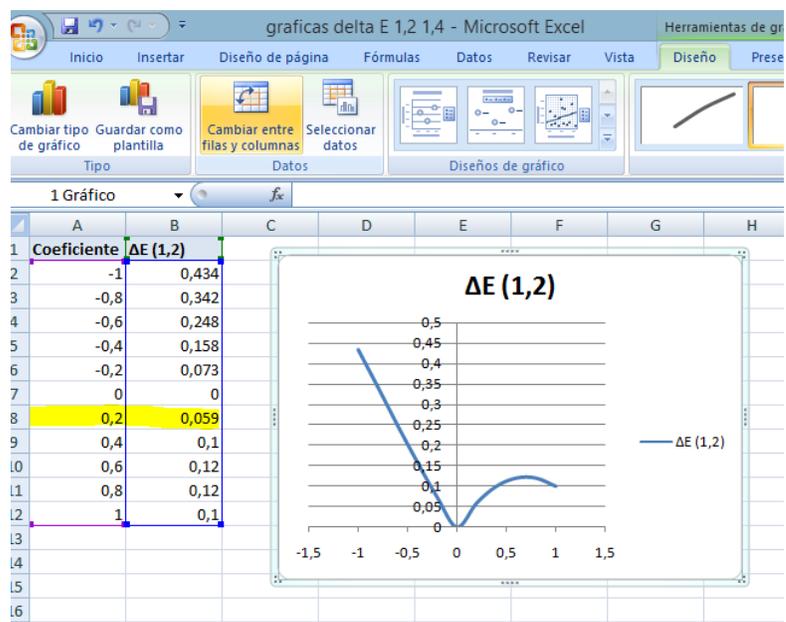


Fig. 30c. Vista del programa Excel usado como herramienta de trabajo para la construcción de las gráficas: Gráfica del diferencial de energía orbitales HOMO-LUMO del Benceno Vs. Efecto Inductivo $\pm 1\sigma$.

TERCERA PARTE

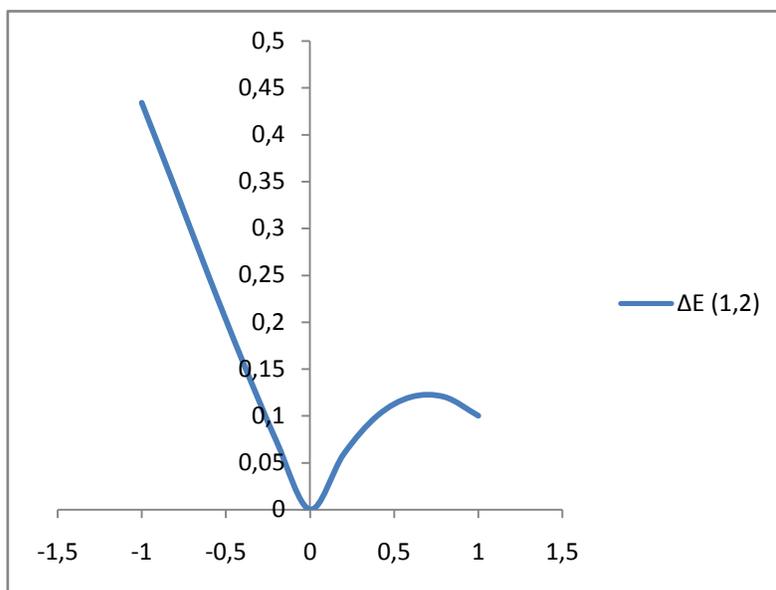
RESULTADOS

CAPÍTULO IV: RESULTADOS OBTENIDOS

Mediante cálculos realizados en el modelo molecular Huckel se han utilizado ciertos parámetros inductivos de los sustituyentes que están localizados en posiciones distintas de la molécula del Benceno. Dichos resultados dan una idea clara acerca del nivel de energía del primer orbital desocupado en la molécula del benceno, LUMO. En este proceso se utiliza el método de comparación con los niveles energéticos calculados dígase los aniones radicales de sus derivados y se da a conocer que hay una relación entre los dos orbitales degenerados LUMO, anti-simétrico y simétrico del Benceno. Es aquí donde prevalece la acción del Benceno en el cerebro. Se utiliza EO para designar las energías de los orbitales moleculares en algunos casos.

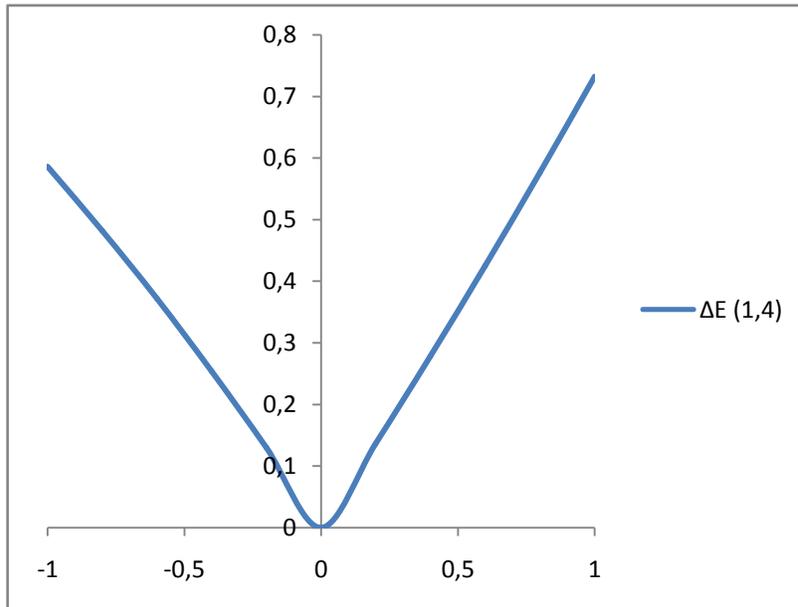
IV.1 Resultados obtenidos al comparar valores de efecto inductivo con el diferencial de energía en unidades beta para los OM cuarto y quinto del benceno sustituido.

Coeficiente	$\Delta E \beta (1,2)$
-1	0,434
-0,8	0,342
-0,6	0,248
-0,4	0,158
-0,2	0,073
0	0
0,2	0,059
0,4	0,1
0,6	0,12
0,8	0,12
1	0,1



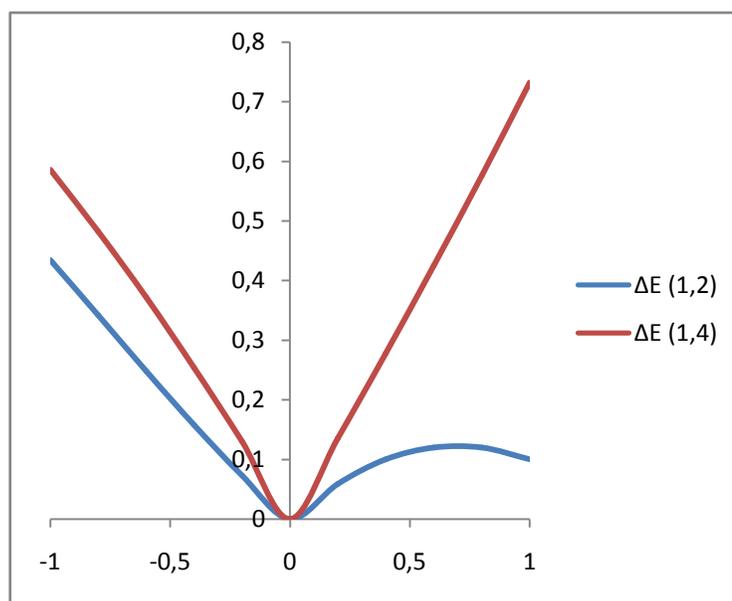
Gráfica 1. Diferencial de energía entre orbitales IV y V en posición (1,2) del Benceno sustituido.

Coefficiente	$\Delta E \beta(1,4)$
-1	0,586
-0,8	0,482
-0,6	0,372
-0,4	0,254
-0,2	0,13
0	0
0,2	0,136
0,4	0,278
0,6	0,425
0,8	0,576
1	0,732



Gráfica 2. Diferencia de energía entre orbitales IV y V en posición (1,4).

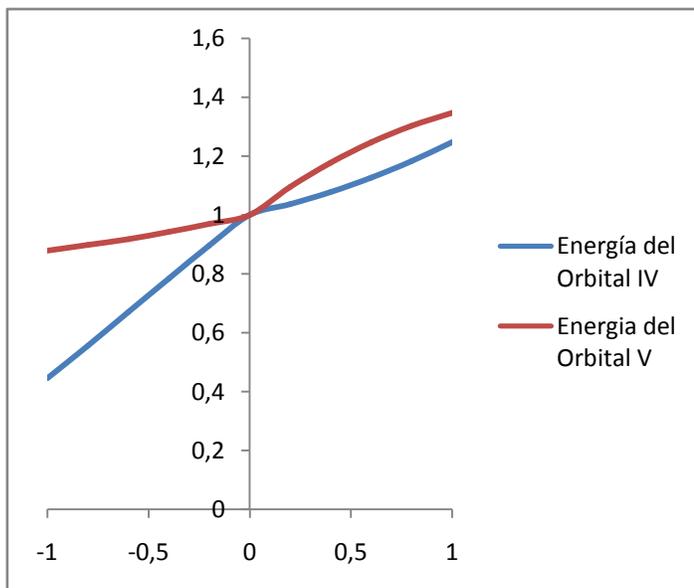
Coefficiente	$\Delta E \beta(1,2)$	$\Delta E \beta(1,4)$
-1	0,434	0,586
-0,8	0,342	0,482
-0,6	0,248	0,372
-0,4	0,158	0,254
-0,2	0,073	0,13
0	0	0
0,2	0,059	0,136
0,4	0,1	0,278
0,6	0,12	0,425
0,8	0,12	0,576
1	0,1	0,732



Gráfica 3. Diferencia de energía entre orbitales IV y V en posición (1,2; 1,4).

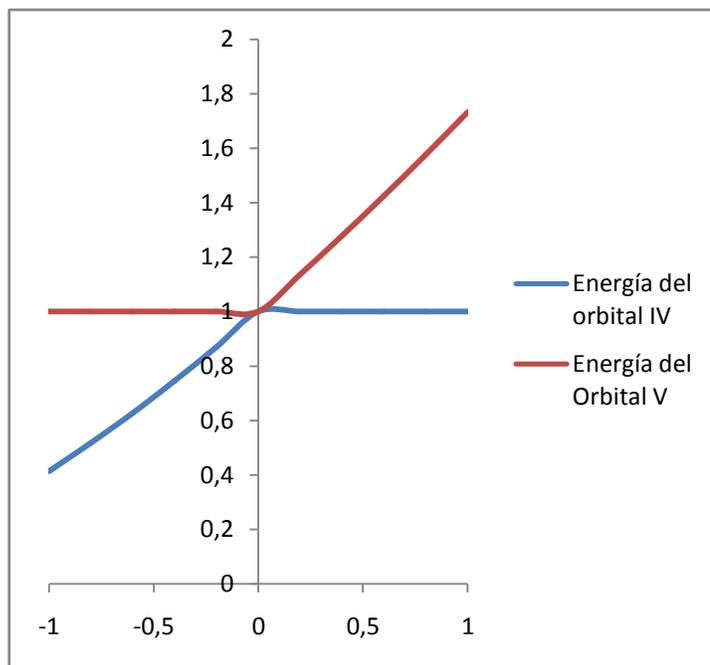
IV. 2 Resultados obtenidos al comparar valores de efecto inductivo con los valores de energía en unidades beta para los OM cuarto y quinto del benceno.

Coeficiente	EO IV β	EO V β
1	1,247	1,347
0,8	1,182	1,302
0,6	1,126	1,246
0,4	1,077	1,177
0,2	1	1,095
0	1	1
-0,2	0,896	0,969
-0,4	0,784	0,942
-0,6	0,67	0,918
-0,8	0,556	0,898
-1	0,445	0,879



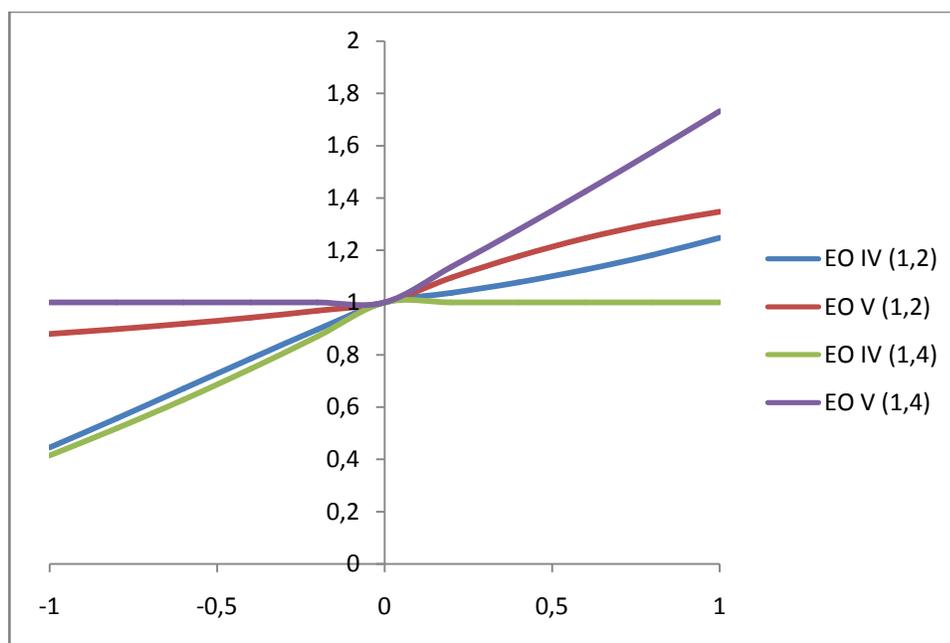
Gráfica 4. HOMO- LUMO. Posición 1,2 del benceno con efectos inductivos (+) y (-)

Coeficiente	EO IV β	EO V β
1	1	1,732
0,8	1	1,576
0,6	1	1,425
0,4	1	1,278
0,2	1	1,136
0	1	1
-0,2	0,87	1
-0,4	0,746	1
-0,6	0,628	1
-0,8	0,518	1
-1	0,414	1



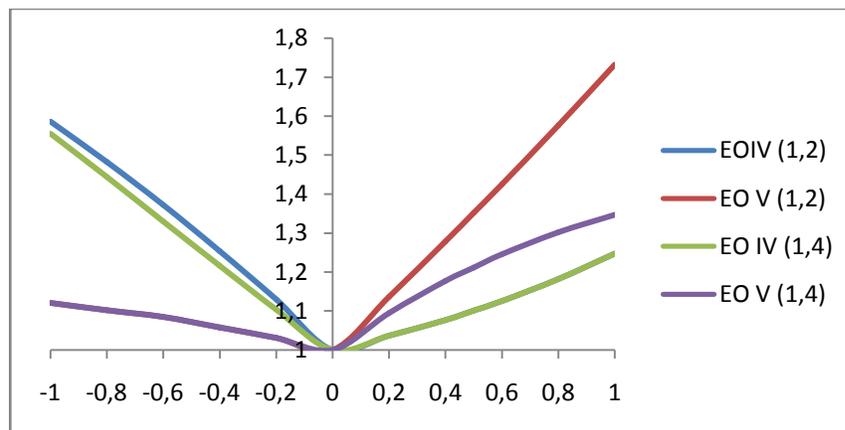
Gráfica 5. HOMO- LUMO. Posición 1,4 del benceno con efectos inductivos (+) y (-).

Coeficiente	EO IV (1,2) β	EO V (1,2) β	EO IV (1,4) β	EO V (1,4) β
1	1,247	1,347	1	1,732
0,8	1,182	1,302	1	1,576
0,6	1,126	1,246	1	1,425
0,4	1,077	1,177	1	1,278
0,2	1	1,095	1	1,136
0	1	1	1	1
-0,2	0,896	0,969	0,87	1
-0,4	0,784	0,942	0,746	1
-0,6	0,67	0,918	0,628	1
-0,8	0,556	0,898	0,518	1
-1	0,445	0,879	0,414	1

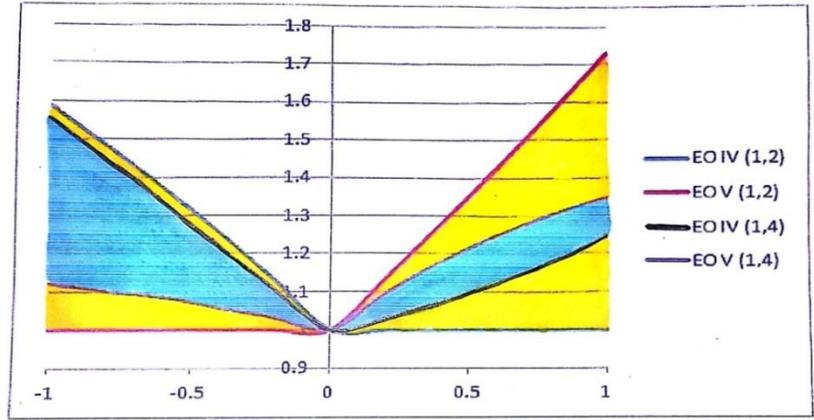


Gráfica 6. HOMO- LUMO: Posiciones (1,2 y 1,4) del benceno con efectos inductivos (+) y (-).

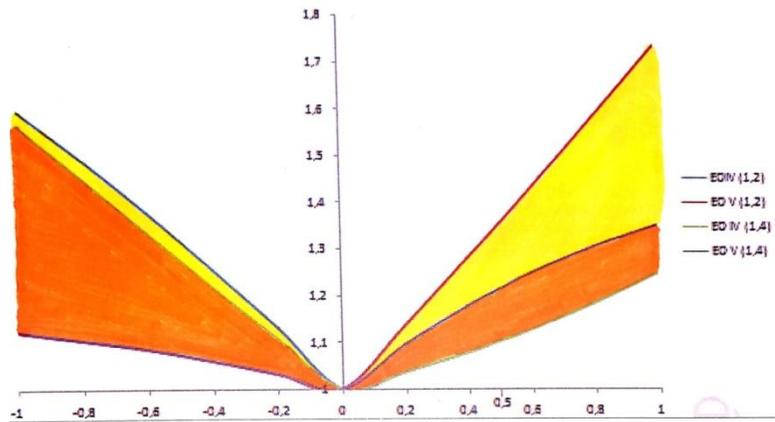
Coeficiente	EO IV (1,2) β	EO V (1,2) β	EO IV (1,4) β	EO V (1,4) β
1	1	1,732	1,247	1,347
0,8	1	1,576	1,182	1,302
0,6	1	1,425	1,126	1,246
0,4	1	1,278	1,077	1,177
0,2	1	1,136	1	1,095
0	1	1	1	1
-0,2	1,13	1	1,104	1,031
-0,4	1,254	1	1,216	1,058
-0,6	1,372	1	1,33	1,085
-0,8	1,482	1	1,444	1,102
-1	1,586	1	1,555	1,121



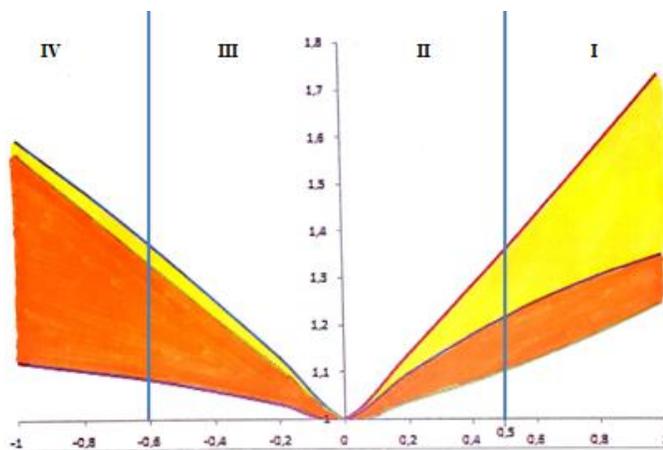
Gráfica 7a. Modificación de gráfica 6 con inversión de valores correspondientes a β .



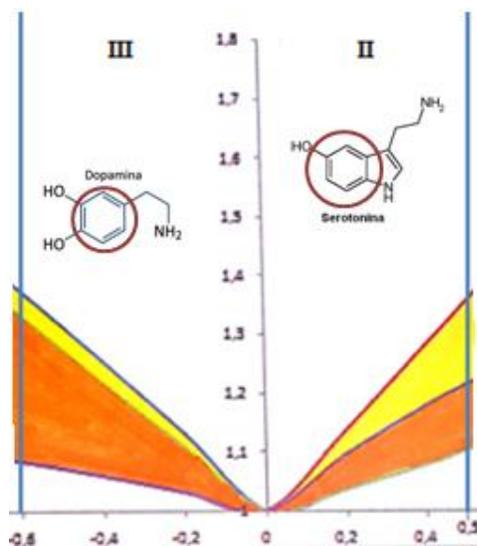
Gráfica 7b. Identificación las regiones de acción de las sustituciones estudiadas. Amarillo para posición 1,4 y azul para posición 1,2.



Gráfica 8. Modificación de gráfica 6 con inversión de valores correspondientes a β omitiendo la parte inferior de la 1,4.



Gráfica 9. División de las regiones del gráfico 8 que representan los distintos niveles de energía para hacer coincidir con predicciones originales de J. Concepción.



Gráfica 10. Delimitación de las regiones de los neurotransmisores Dopamina, Serotonina y moléculas similares.

CAPÍTULO V: ANÁLISIS E INTERPRETACIÓN DE LOS RESULTADOS

V.1 Análisis e Interpretación de los resultados obtenidos al comparar valores de efecto inductivo con el diferencial de energía en unidades beta para los Orbitales moleculares cuarto y quinto del benceno sustituido.

En la gráfica 1 se muestra la relación entre el efecto inductivo tanto positivo como negativo respecto al cambio de energía en unidades β entre los orbitales quinto y cuarto para el benceno sustituido en las posiciones (1,2). Para efectos inductivos electro donantes (I+) se observa que el cambio en energía es menor en comparación con los electro atrayentes (I-).

En la gráfica 2 se muestran la relación entre el efecto inductivo tanto positivo como negativo respecto al cambio de energía en unidades β entre los orbitales quinto y cuarto para el benceno sustituido en las posiciones (1,4). También en esta gráfica se puede apreciar que el cambio de energía entre los efectos inductivos electrodonantes (I+) y los electroatrayentes (I-) es similar. En la gráfica 3 es la unificación de las gráficas anteriores la cual permite visualizar el grado de variación entre las diferentes sustituciones.

V. 2 Análisis e interpretación de resultados obtenidos al comparar valores de efecto inductivo con los valores de energía en unidades beta para los orbitales moleculares degenerados cuarto y quinto del benceno.

En la gráfica 4 se muestra la relación entre el efecto inductivo tanto positivo como negativo respecto a los valores de las energías en unidades β orbitales quinto y cuarto para el benceno sustituido en las posiciones (1,2). La gráfica 5 muestra la misma relación para la sustitución (1,4).

La gráfica 6 es la combinación de los gráficos 4 y 5, la cual permite ver las transiciones para distintos valores de efecto inductivo de los orbitales simétrico y asimétrico en las sustituciones anteriormente especificadas. Los parámetros de energía

beta utilizados en esta aproximación pueden ser relacionados con otras unidades energía lo que facilita vincular este estudio a los niveles de energía cerebrales.

Las Gráficas 7a y 7b muestran los cambios de energía en unidades β con la misma tendencia energética que la de los efectos inductivos positivos y negativos entre los orbitales simétrico y asimétrico. Se hace una modificación de la gráfica 6 con inversión de valores correspondientes a β sumando una unidad a los valores de energía debajo del eje. Esta modificación algebraica no representa una alteración a los resultados buscados. Moléculas derivadas de benceno que tengan O, C, H en las que uno pueda notar el benceno como el centro de atracción, se pueden deducir las energías de los orbitales HOMO-LUMO debido a las posiciones de los sustituyentes.

En la gráfica 8 se omite la parte inferior de la región 1,4 identificada en la gráfica 7b ya que los efectos que se observan deben tener máxima energía y para hacerla coincidir con la predicción inicial de Concepción. *Ver anexo VI, gráfica D.* La división de las regiones del gráfico 8 representada en la gráfica 9 muestra los distintos niveles de energía para hacer coincidir la misma a las predicciones originales de J. Concepción que en trabajos anteriores había realizado una gráfica muy similar en donde localizaba las regiones de los cuatro niveles del cerebro y las energías que estos representaban. *Ver Anexo VI, gráfica C.*

La delimitación de las regiones de los neurotransmisores Dopamina, Serotonina y moléculas similares es lo que se muestra en la gráfica 10. En Huckel se trabaja con unidades de Energía Beta, las cuales tienen equivalencia para electrón-voltios (eV), Hertz y Kcal. 1 hertz = $4.135665538536 \times 10^{-15}$ eV, 1 kilocaloría (IT) = $2.6131938841 \times 10^{+22}$ eV y Beta = -0.7 eV. Por consiguiente, las gráficas obtenidas en el capítulo IV nos muestran el resultado de un nuevo modelo cerebral que facilitará la comprensión de los efectos de neuromoléculas pudiendo predecir las acción de las mismas ya sean anestésicas, tranquilizantes, eufóricas o motivantes. Estas graficas muestran los rangos de energía de moléculas con sustituyentes con efectos inductivos desde +I a -I y donde la mayor acción está comprendida cerca de los ejes de +0.5 y -0.6 referenciados por la Serotonina y la Dopamina.

CUARTA PARTE:
CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES

CAPÍTULO VI: CONCLUSIONES

Se puede utilizar una aproximación sencilla a la teoría de Huckel para hacer predicciones sobre la estabilidad de neurotransmisores. Los cálculos teóricos en medicamentos y neurotransmisores son considerados complejos, una aproximación sencilla al Benceno como eje central da una tendencia que permite demostrar las diferencias entre los valores de energía de los niveles del cerebro.

El diferencial en energía se calcula entre la diferencia de los valores de energía entre los orbitales 4 y 5. Este diferencial de energía se observa para las posiciones 1,2 del Benceno utilizando los efectos positivos y negativos de los efectos electrodonantes y electroatrayentes de los sustituyentes que están directamente relacionados con el nivel II Serotonina y III Dopamina.

Este modelo puede ser una forma más adecuada para enseñar a todas las disciplinas asociadas a la salud, la importancia de estudiar las moléculas que se utilizan en dicha área de una manera más sencilla. Debido al proceso y a los resultados obtenidos en este trabajo de grado se pueden sugerir la realización de otros trabajos de grado usando la aproximación sencilla de Huckel que se ha desarrollado.

Este trabajo ha permitido ver la esencia de la química, debido a que se logra profundizar en ciertos puntos de gran importancia como la influencia de la simetría de los orbitales moleculares que participan en los mecanismos de una reacción. Gracias a la simplicidad desarrollada se pueden explicar con más claridad fenómenos tales como: la simetría en los orbitales de Benceno y el poder inductivo en los sustituyentes del mismo, los cuales le dan las características en la función analgésica, anestésica, eufórica y estimulante, por lo que las personas interesadas en estudiar estos temas podrán entenderlos con mayor facilidad.

CAPITULO VII: RECOMENDACIONES

La aproximación sencilla de Huckel puede ser utilizada para el estudio más detallado en neuromedicamentos, en alimentos y en agentes dopantes. Esta aproximación además permite hacer estudios relacionados a la salud mental de las personas usando la posible estabilidad de los niveles simétricos y asimétricos del Benceno asociándolos con los estados mentales. Para trabajos posteriores se recomienda utilizar efectos inductivos más específicos.

Se propone también la idea de hacer estudios multidisciplinarios (educación, medicina, psicología, administración, deportes, música) que envuelvan tanto la interpretación Huckel como el Sistema de Evaluaciones Dinámicas desarrollado por Concepción en 2006, en donde, estos estudios sean el eje central para el desarrollo de un instituto de neurociencias con orientación a las ciencias básicas.

QUINTA PARTE

REFERENCIAS

CAPÍTULO VIII: REFERENCIAS.

VIII.1 Bibliografía

- Guyton, (1987) *Anatomía y Fisiología del sistema nervioso*. Editorial Panamericana. Buenos Aires.
- Wade, Leroy, (2011) *Química orgánica*. Volumen 2. Séptima edición. Pesaron. México.
- McMurry, (2008) *Química Orgánica*. Séptima edición. Cengage Learning.
- Jibu, M., y Yasue, K., (1995). *Quantum brain dynamics and consciousness*, John Benjamin, Amsterdam, The Netherlands.
- Longstaff, A. (2005). *Neuroscience*, 2nd Ed., Taylor and Francis, New York.
- Gardner, H. (1995). *Leading Minds*, Basic Books, New York.
- Hawking, S. (2001). *The Universe in a Nutshell*, Bantam Book, New York.
- Herrmann, N., (1996). *The Whole Brain Business Book*, McGraw Hill, New York
- Barrow, (1972). *Química Física*. Volumen 1. Editorial Reverté. España.
- Penrose, R., (1999). *The Emperor's New Mind*, Oxford University Press, Oxford.
- Eduardo Primo Yúfera, (1996). *Química orgánica básica y aplicada: de la molécula a la industria*. Volumen 1. Universidad Politécnica de Valencia, Editorial Reverte.
- Morrison & Boyd, (1987). *Química Orgánica*. Quinta Edición. Editorial Pearson. Universidad de Nueva York.

VIII.2 Artículos y publicaciones consultados.

- Stevenson, G., Concepción, J.G., y Castillo, G., (1973). Electron spin resonance of nitrosamine anion radicals, *Journal of Physical Chemistry* 77, 611-614.
- Stevenson, G. R., Concepción, J. G., y Echegoyen, L., (1974). The Effect of electron releasing groups upon the Molecular Orbitals and Anion Disproportionation Equilibria of substituted Cyclooctatetraenes, *Journal of the American Chemical Society*. 96, 5452-5455.
- Concepcion, J. G., (2011), Symmetry dynamics in leadership and management: Scientific approach to brain symmetry and entrepreneur conditions of individuals and organizations. *Abstracts of 43th World Chemistry Congress IUPAC*, Puerto Rico #1269, 449.
- Concepcion, J. G., (2006), Symmetry Dynamics in Leadership and Management, *NSTI-Nanotech*, ISBN 0-9767985-7-3, 2, 341-4.
- Lucio Tonello (2015), *On the possible quantum role of serotonin in consciousness*. Journal of Interactive Neuroscience Vol. 14, No. 2. Imperial College Press.
- Hameroff & Craddock (2015), *Anesthetics Act in Quantum Channels in Brain Microtubules to Prevent Consciousness*. Current Topics in Medicinal Chemistry, 15, 523-533.
- Hameroff & Penrose (2014) *Consciousness in the universe A review of the 'Orch OR' theory*. Physics of Life Reviews 11, 39-78.

VIII.3 Webgrafía.

- <http://universitam.com/academicos/noticias/el-cerebro-humano-tiene-14-mil-millones-de-neuronas-menos-de-lo-establecido-antes/>
- http://web.ua.es/cuantica/docencia/a_qc/practicas/node12.html
- http://research.cm.utexas.edu/nbauld/unit6_anrad.htm
- http://www.bibliotecapleyades.net/ciencia/ciencia_brain69.htm
- <http://elperello.blogspot.com/2009/04/los-sonidos-y-las-ondas-ceerebrales.html>
- <https://ocw.mit.edu/courses/chemistry/5-61-physical-chemistry-fall-2007/lecture-notes/lecture31.pdf>
- http://www.bibliotecapleyades.net/ciencia/ciencia_brain69.htm
- <http://www.svneurologia.org/libro%20ictus%20capitulos/cap2.pdf>
- http://vitae.ucv.ve/pdfs/VITAE_3427.pdf
- <http://www.fisiologia.buap.mx/online/DraFloresUA/gaba-neurociencias.pdf>
- <http://francis.naukas.com/2015/06/22/sobre-la-teoria-cuantica-de-la-consciencia-de-hameroff-y-penrose/>
- http://www.quantumconsciousness.org/sites/default/files/1998%20Hameroff%20Quantum%20Computation%20in%20Brain%20Microtubules%20The%20Penrose%20Hameroff%20Orch%20OR%20model%20of%20consciousness%20-%20Royal%20Society_0.pdf
- https://www.madrimasd.org/informacionidi/biblioteca/publicacion/doc/VT/VT11_nanotubos.pdf
- <http://www.razonypalabra.org.mx/N/n68/maubert.pdf>
- <http://noticiasdelaciencia.com/not/5119/nuevo-modelo-de-sinapsis-para-estudiar-a-fondo-trastornos-cerebrales/>
- http://personal.us.es/marquez/QFII/Guiones_Ed7.pdf
- <https://bluffton.edu/homepages/facstaff/bergerd/classes/CEM311/huckel/ethylene.html>
- http://www.hulis.free.fr/huckel_theory_delocalization//

SEXTA PARTE

ANEXOS

ANEXO I

FIGURAS

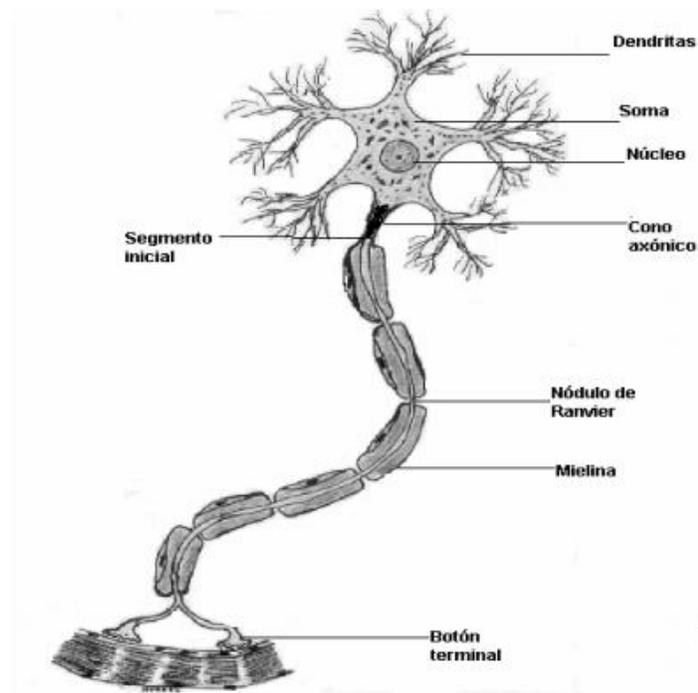


Figura 1. Descripción de una neurona.

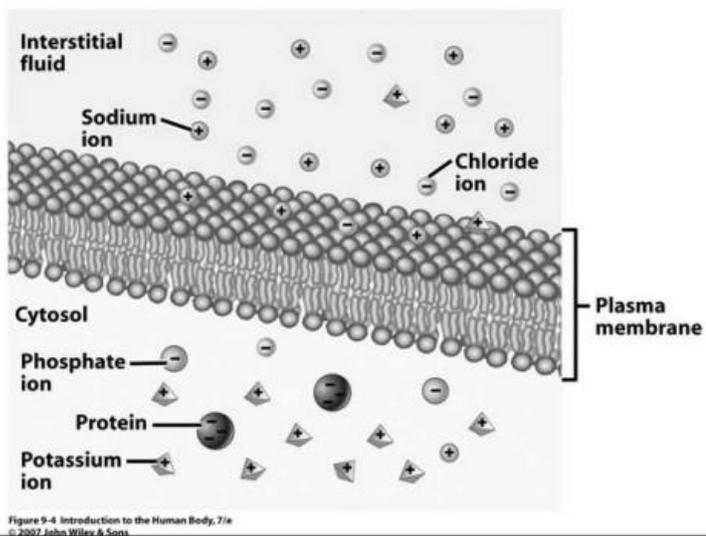


Fig. 2 Interacción de los iones sodio y potasio en la membrana plasmática de las neuronas.

Figura 1 tomada de: medicina.unmsm.edu.pe/images/investigacion/.../libros/.../Capitulo7.pdf
 Figura 2 tomada de: Wiley, John (2007). Introduction to the human body.

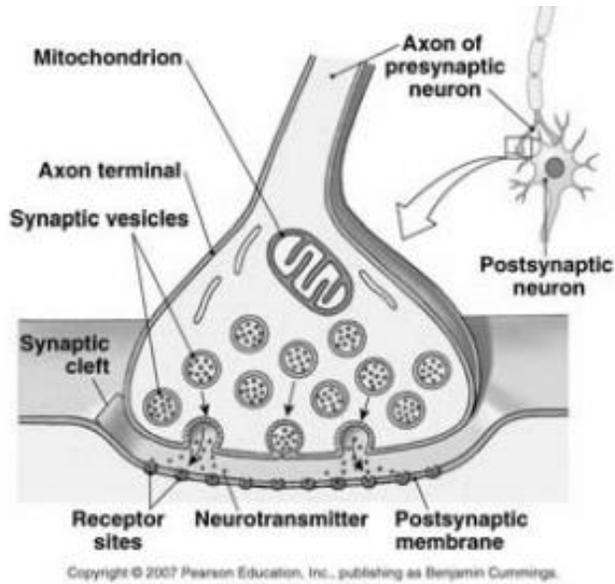


Figura 3. Descripción de la Sinapsis.

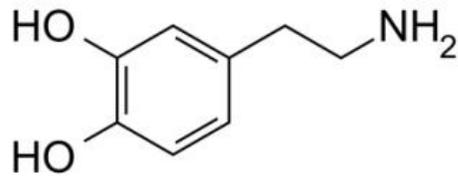


Figura 4. Estructura de la Dopamina.

Figura 3 tomada de: Cumming, Benjamin (2007). Pearson Education.

Figura 4 tomada de: <http://q1n2o4dmimpdre0bd50wguvh.wpengine.netdna-cdn.com/wp-content/uploads/2016/09/que-es-la-dopamina.jpg>

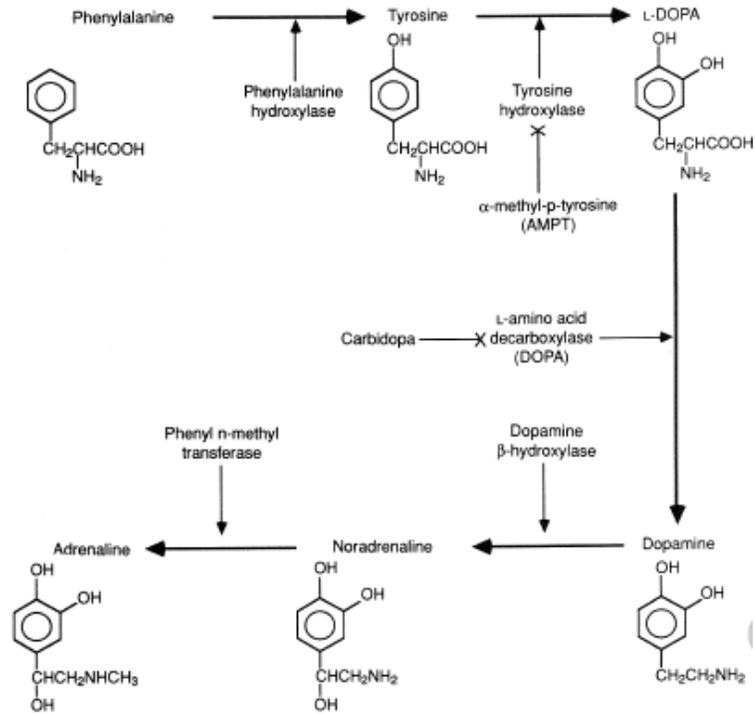


Figura 5. Síntesis de las Catecolaminas.

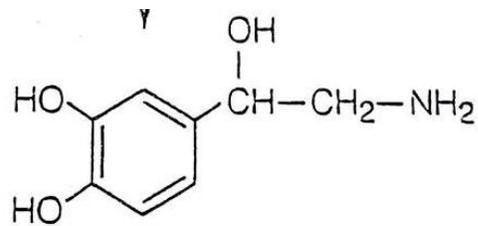


Figura 6. Estructura de la Noradrenalina.

Figura 5 tomada de: www.rcpsych.ac.uk/pdf/semBasNeuro_chapter3.pdf
 Figura 6 tomada de: Longstaff (2005). Neuroscience.

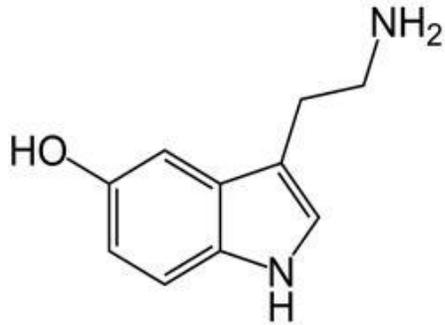


Figura 7. Estructura de la Serotonina.

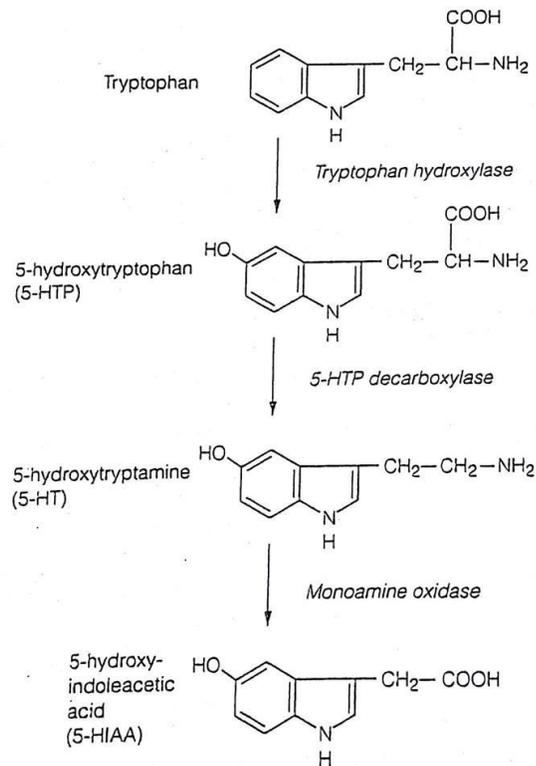


Figura 8. Síntesis de la Serotonina.

Figura 7 tomada de: <http://mundoasistencial.com/mundoasistencial/wp-content/uploads/2015/04/serotonina.jpg>
 Figura 8 tomada de: Longstaff (2005). Neuroscience.

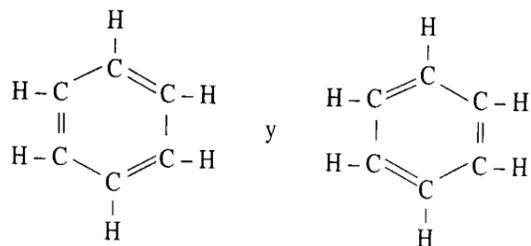


Figura 9. Estructura del Benceno

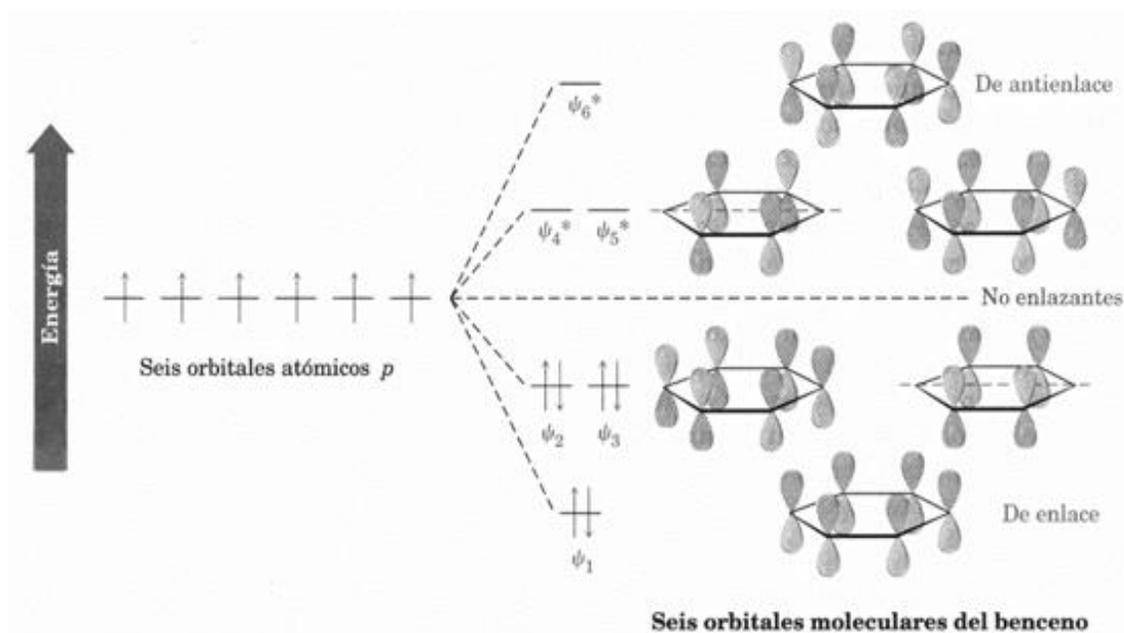


Figura 10. Orbitales P del Benceno.

Figura 9 tomada de: <http://html.rincondelvago.com/000062980.png>
 Figura 10 tomada de: Mc.Murry (2008) Química Orgánica.

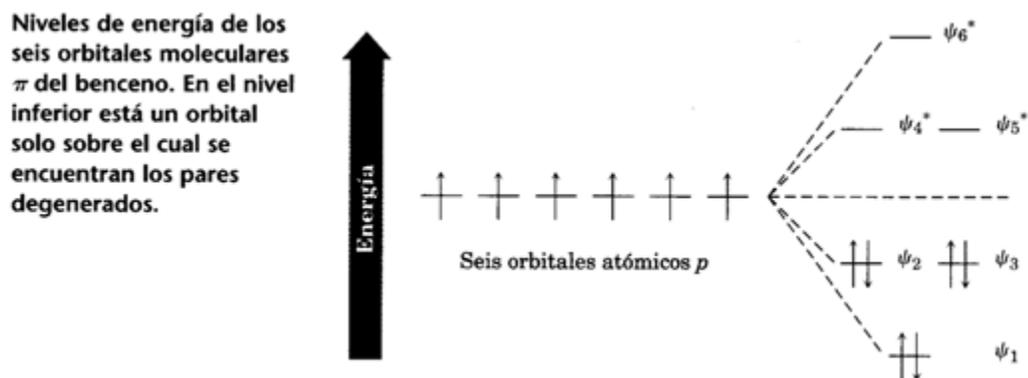


Figura 11. Niveles de Energía de OM del Benceno descritos. Los orbitales segundo, tercero, cuarto y quinto son degenerados.

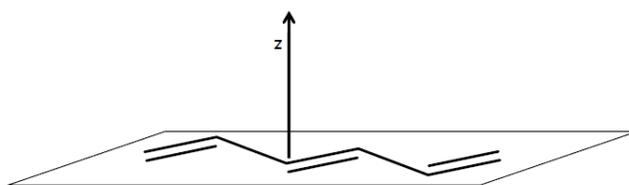


Figura 12. Simetría de reflexión de una molécula conjugada respecto al eje Z.

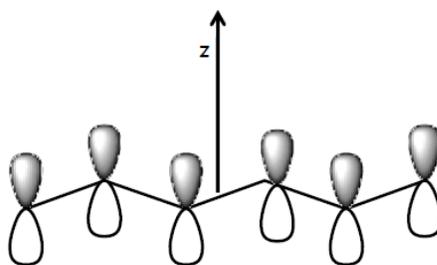


Figura 13. Orbitales π_z en combinación con Orbitales p_z .

Figura 11 tomada de: Mc.Murry (2008) Química Orgánica.

Figuras 12 y 13 tomadas de: <https://ocw.mit.edu/courses/.../5.../lecture31.pdf>

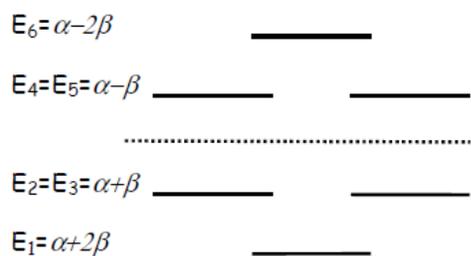


Fig. 14a. Energías de los orbitales moleculares del Benceno determinadas por aproximaciones de Huckel.

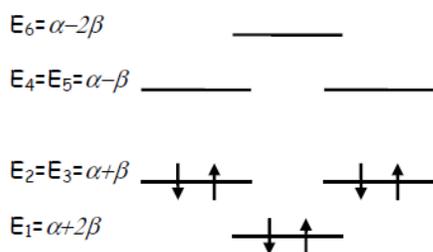


Fig. 14b. Energías de los orbitales moleculares del Benceno determinadas por aproximaciones de Huckel. Visualización de los electrones π ocupando doblemente los primeros tres orbitales moleculares

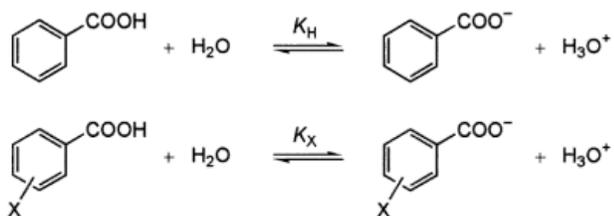


Figura 15. Relaciones de Hammet. Disociación del Acido Benzoico, donde K_H es la constante de equilibrio del compuesto sin sustituir (ácido benzoico) y K_x la constante de equilibrio.

Figuras 14a y 14b tomadas de: <https://ocw.mit.edu/courses/.../5.../lecture31.pdf>

Figura 15 tomada de: Delgado (2003) Introducción a la Química Terapéutica. Página 141.

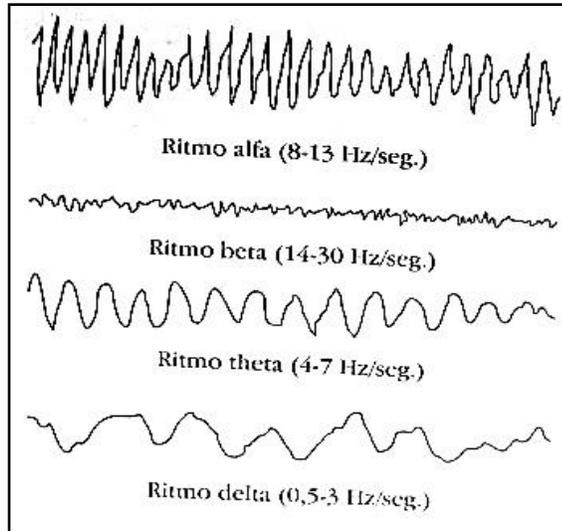


Fig. 16. Ritmos eléctricos en los niveles del cerebro.

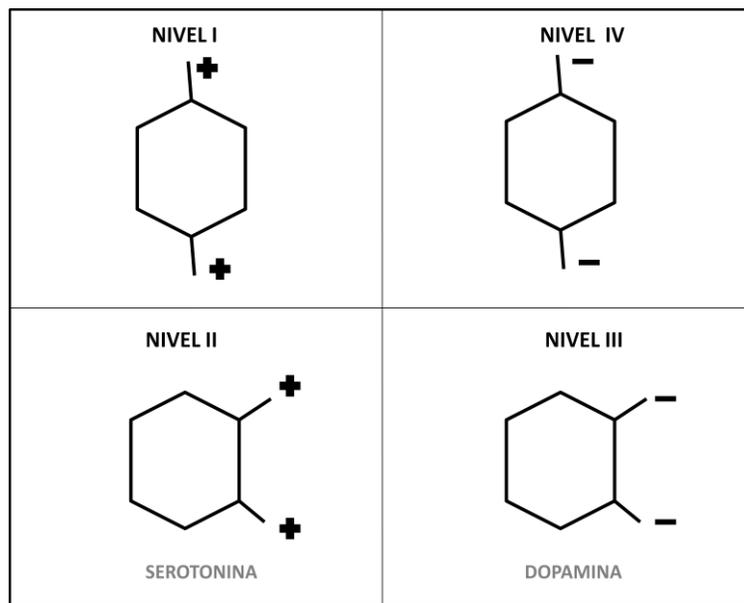


Fig. 17. Modelo que relaciona los niveles de energía del cerebro con neuromoléculas poseedoras de un anillo Benceno.

Figura 16 tomada de: Uribe, 2010. Neurología.
 Figura 17: Luna & Familia (2016)

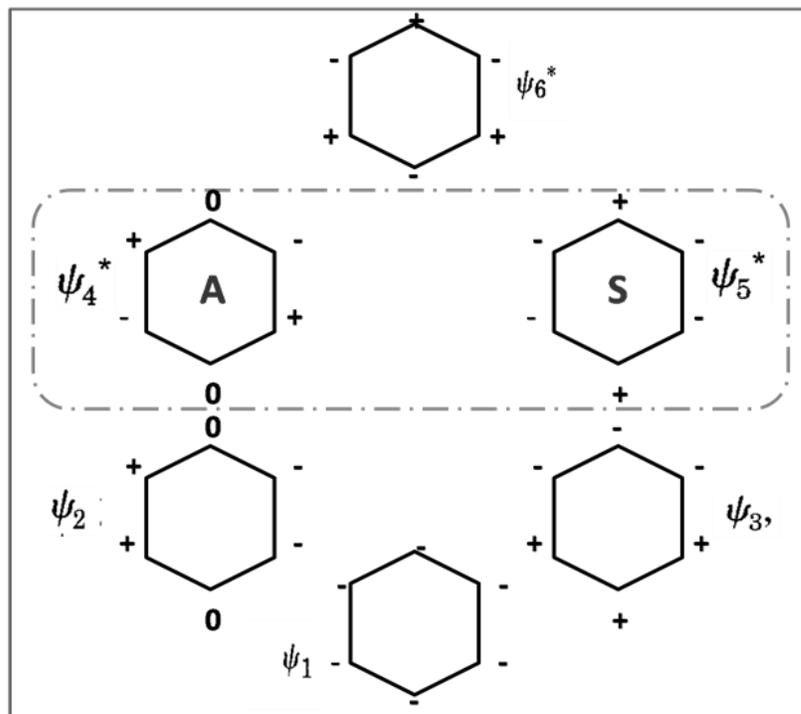


Figura 18. Niveles Energéticos del Benceno.

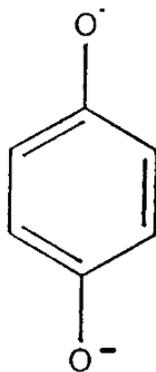


Figura 19. Anión Radical Libre de la Benzoquinona.

Figura 18: Luna & Familia (2016).

Figura 19 tomada de: http://patentimages.storage.googleapis.com/WO1993002711A1/imgf000053_0001.png

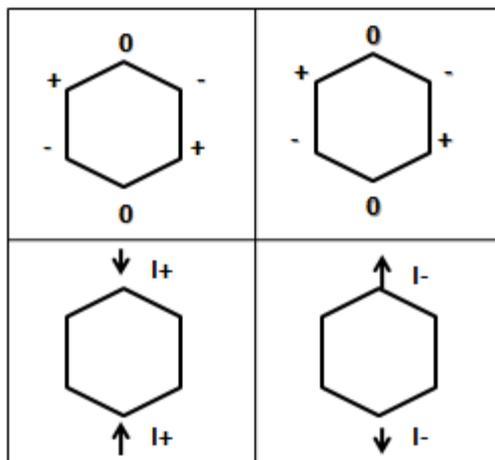


Figura 20. Asociando las densidades electrónicas al nivel de energía del cuarto orbital molecular del Benceno para el modelo de los niveles I y IV.

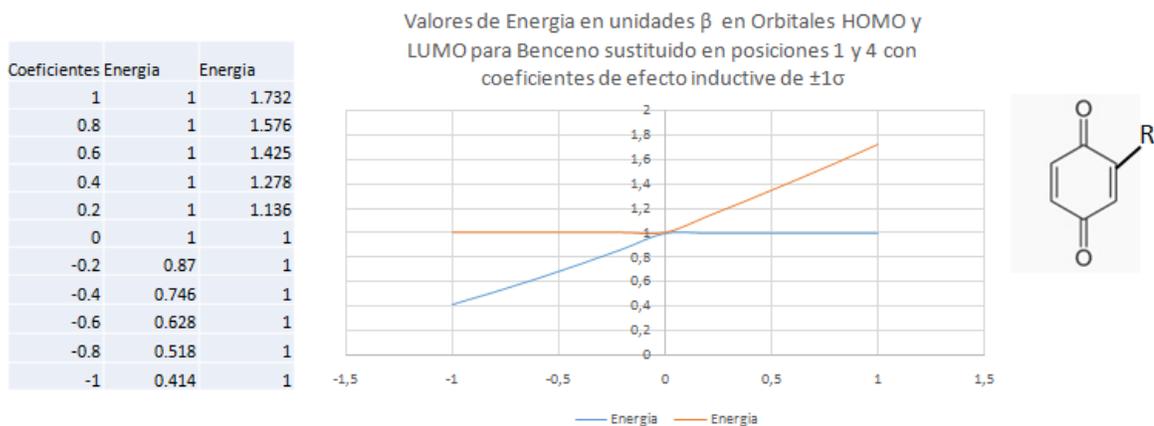


Figura 21. Primer gráfico realizado por J. G. Concepción para el Benceno sustituido en posición 1,4 para el análisis de los valores de energía en los orbitales HOMO y LUMO.

Figura 20: Luna & Familia (2016).

Figura 21 tomada de: Conferencia 2016 Dr. Jesús Gilberto Concepción.

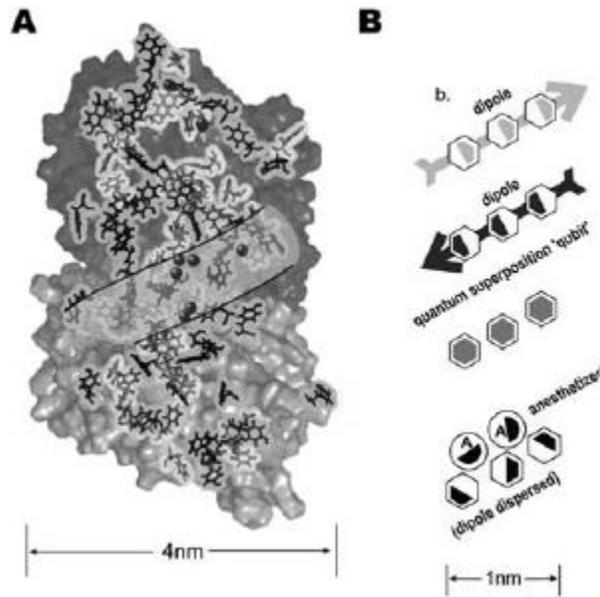


Figura 22. Descripción de los microtúbulos neuronales con residuos de Tirosina, Fenilalanina y Triptófano.

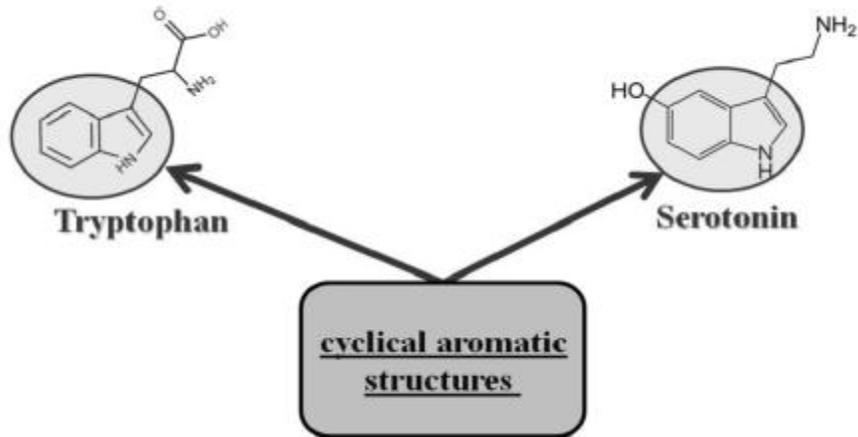


Figura 23. Comparación de las estructuras de Serotonina y Triptófano.

Figura 22 tomada de: Hameroff & Penrose (2015)
 Figura 23 tomada de: Tonello (2015).

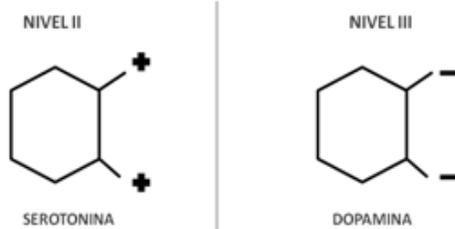
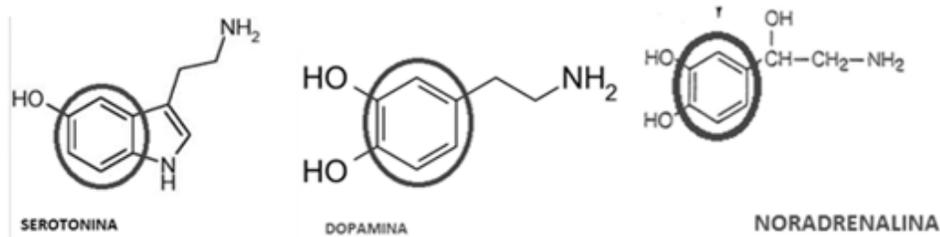


Figura 24. Neurotransmisores con una estructura simplificada al Benceno sustituido.

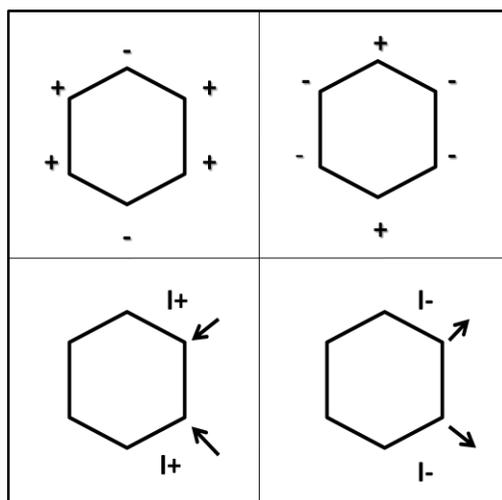


Figura 25. Asociando el nivel de energía del quinto orbital molecular del Benceno para el modelo de los niveles II y III.

Figura 24: Luna & Familia (2016).
 Figura 25: Luna & Familia (2016).

Interactive SHMO

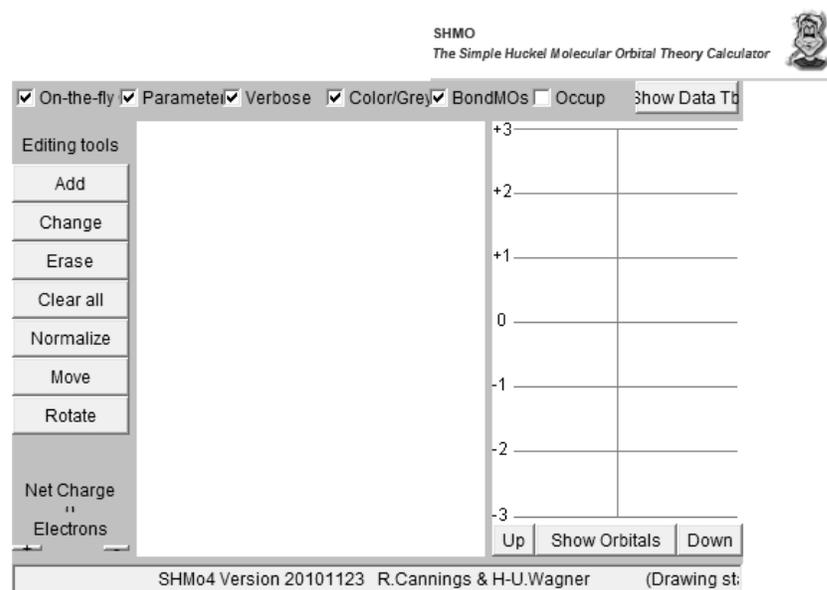


Figura 26. Interfaz gráfica Programa SHMO.

Interactive SHMO

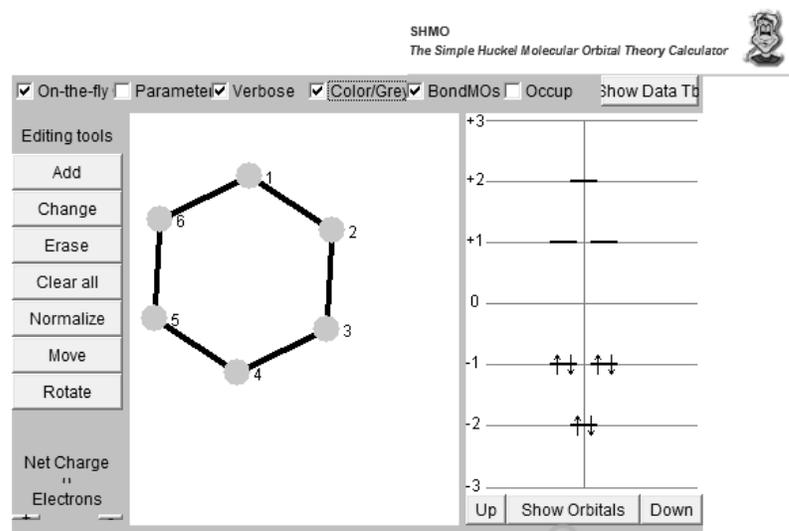


Figura 27. Orbitales moleculares del Benceno en estado basal con SHMO.

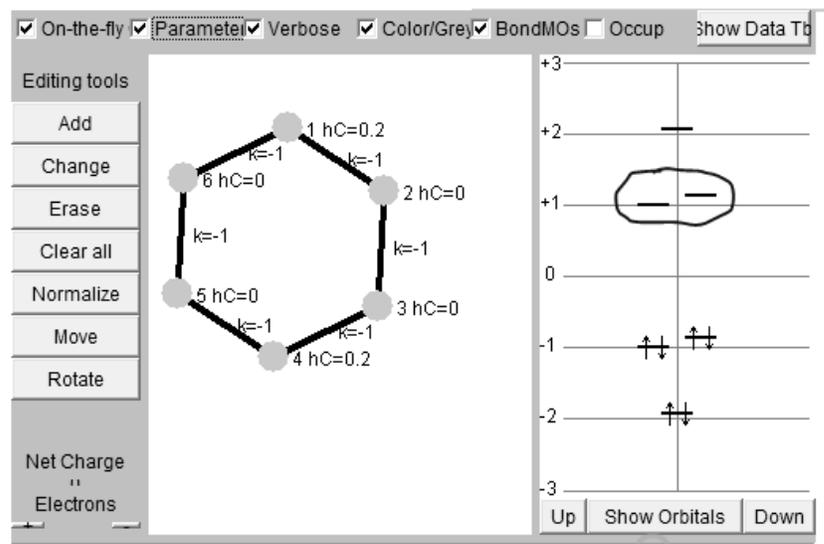


Figura 28. Transición de los Orbitales simétrico y asimétrico por efecto inductivo positivo en las posiciones uno y cuatro del Benceno.

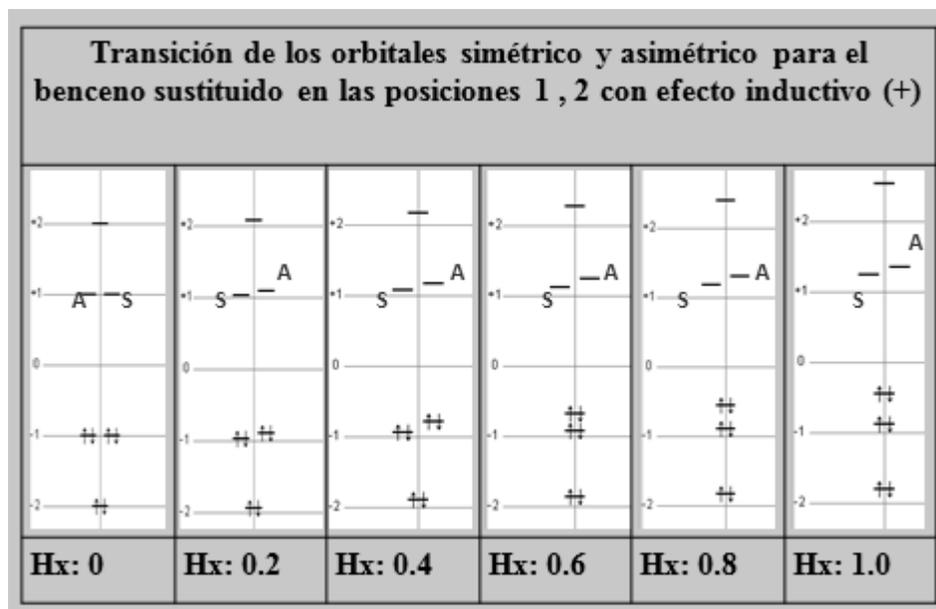
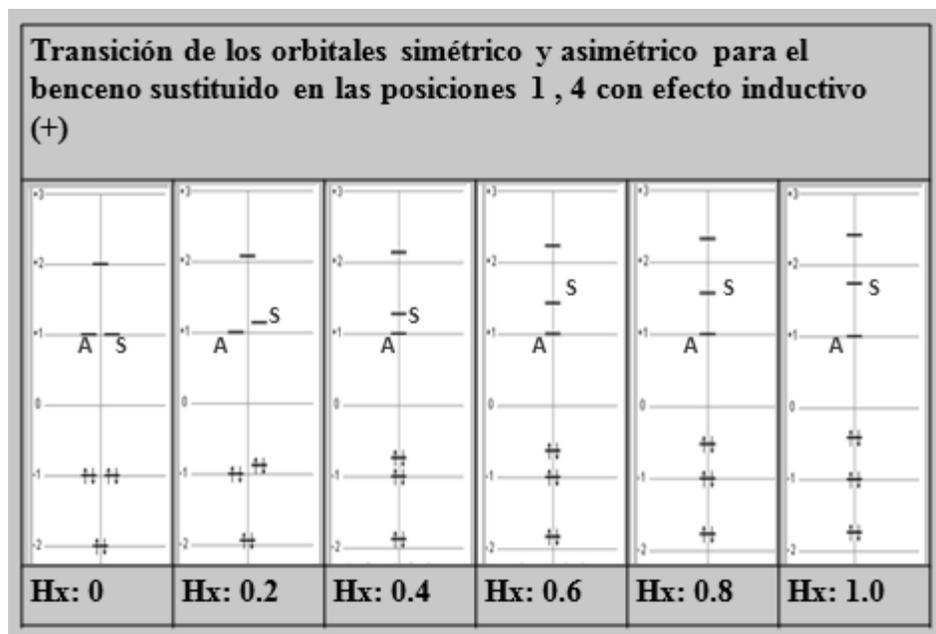


Figura 29. Esquema comparativo en las transiciones de los orbitales asimétrico y simétrico del Benceno en función al efecto inductivo aplicado.

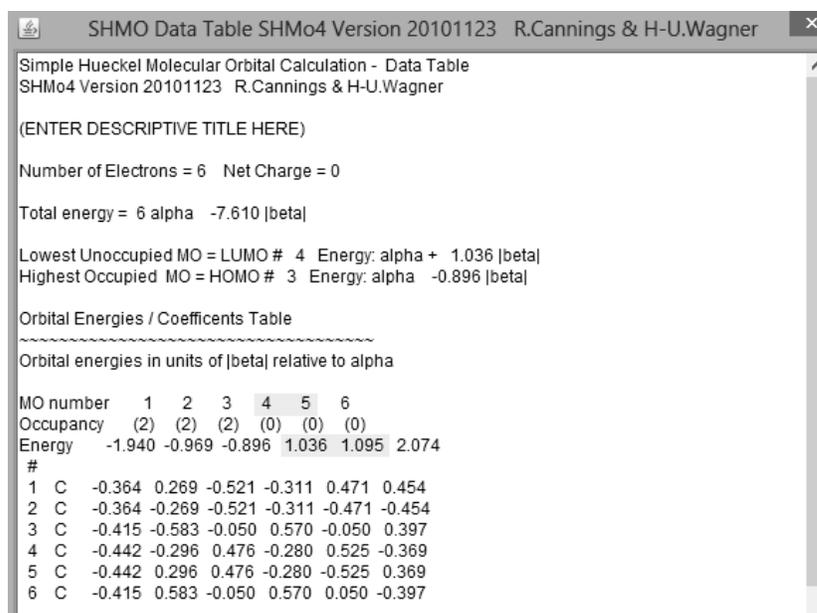


Figura 30a. Tabla de datos de SHMO para el Benceno con efecto inductivo $\sigma = .2$ en las posiciones (1,2): Se resaltan los valores de energía para los OM cuarto y quinto para ese caso.

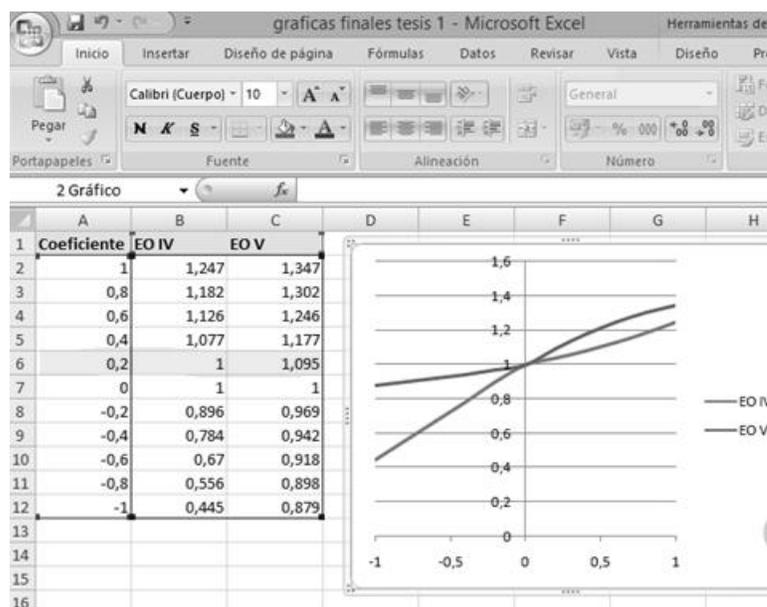


Figura 30b. Vista del programa Excel usado como herramienta de trabajo para la construcción de las gráficas: Gráfica orbitales HOMO-LUMO del Benceno Vs. Efecto Inductivo $\pm 1\sigma$.

Figura 30a tomada de: <http://www.ucalgary.ca/rauk/shmo>.
Figura 30b: Luna & Familia (2016).

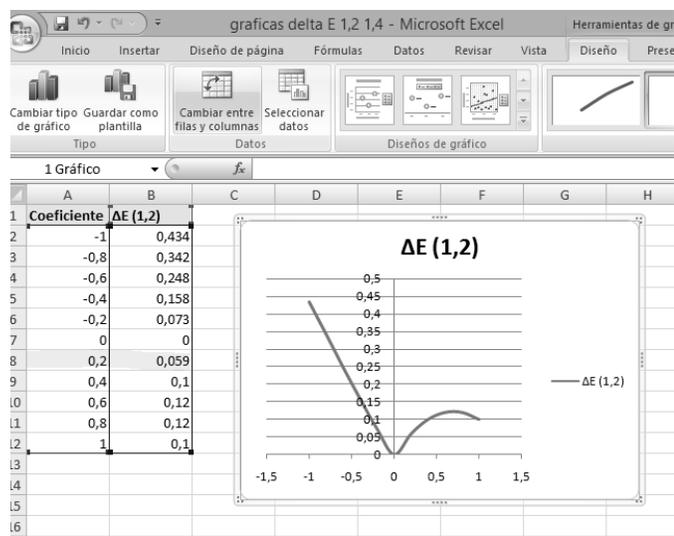


Figura 30c. Vista del programa Excel usado como herramienta de trabajo para la construcción de las gráficas: Gráfica del diferencial de energía orbitales HOMO-LUMO del Benceno Vs. Efecto Inductivo $\pm 1\sigma$.

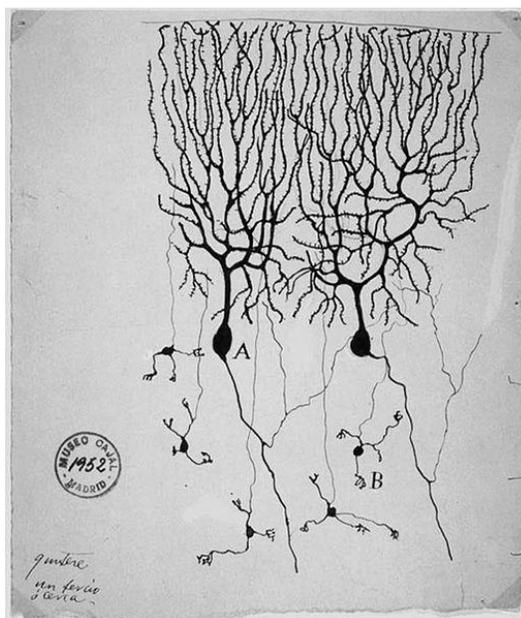


Figura 31. Dibujo de una neurona hecho por Carvajal.

Figura 30c: Luna & Familia (2016).

Figura 31 tomada de: <https://upload.wikimedia.org/wikipedia/commons/thumb/1/15/PurkinjeCell.jpg/440px-PurkinjeCell.jpg>

ANEXO II

TABLAS

TABLA 1

CLASIFICACIÓN DE LOS NEUROTRANSMISORES

CLASE 1
Acetilcolina
CLASE 2: Aminas
Norepinefrina Epinefrina Dopamina Serotonina
CLASE 3: Aminoácidos
Acido Amino butírico, GABA Glicina Glutamato
CLASE 4: Péptidos.

Tabla 1 tomada de: Guyton, (1987). Anatomía y Fisiología del Sistema Nervioso.

TABLA 2

UNA CLASIFICACIÓN DE LOS PRINCIPALES GRUPOS ORGÁNICOS SEGÚN SUS EFECTOS INDUCTIVOS ELECTRÓN-ATRAYENTES O ELECTRÓN-DADORES

Efecto inductivo de varios grupos funcionales*			
+I	-I		
-O [⊖]	-NR ₃ [⊕]	-COOH	-OR
-COO [⊖]	-SR ₂ [⊕]	-F	-C(=O)R
-CR ₃	-NH ₃ [⊕]	-Cl	-SH
-CHR ₂	-NO ₂	-Br	-SR
-CH ₂ R	-SO ₂ R	-I	-OH
-CH ₃	-CN	-OAr	-C≡CR
-D	-SO ₂ Ar	-COOR	-CH=CR ₂

* Comparados con el H. Los grupos están en orden decreciente de atracción o repulsión (grupos -I o +I).

Tabla 2 tomada de: Yúfera (1996). Química orgánica básica y aplicada: de la molécula a la industria.

TABLA 3

VALORES DE SIGMA PARA ALGUNOS SUSTITUYENTES

Sustituyente	σ_m	σ_p	Sustituyente	σ_m	σ_p
H	0,00	0,00	CN	0,56	0,66
Br	0,39	0,23	CO ₂ ⁻	-0,10	0,00
Cl	0,37	0,23	CHO	0,35	0,42
F	0,34	0,06	CO ₂ H	0,37	0,45
I	0,35	0,18	CF ₃	0,43	0,54
NO ₂	0,71	0,78	C=O(NH ₂)	0,28	0,36
NH ₂	-0,16	-0,66	CH ₃	-0,07	-0,17
NH ₃ ⁺	0,86	0,60	CH ₂ OH	0,00	0,00
O ⁻	-0,47	-0,81	COCH ₃	0,38	0,50
OH	0,12	-0,37	C=O(OEt)	0,37	0,45
OCH ₃	0,12	-0,27	C(CH ₃) ₃	-0,10	-0,20
OC=O(CH ₃)	0,39	0,31	C ₆ H ₅	0,06	-0,01

Tabla 3 tomada de: Delgado (2003). Introducción a la Química Terapéutica. Página 142.

TABLA 4

NEUROTRANSMISORES EN LOS DISTINTOS NIVELES DEL CEREBRO

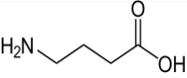
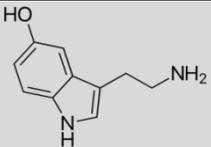
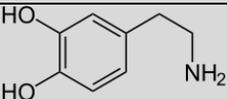
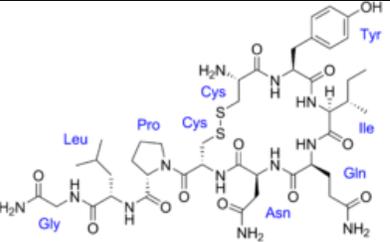
Neurotransmisores	Estructuras	Niveles cerebrales	Ondas Cerebrales
Gaba		I	Delta 1 Hz- 4 Hz
Serotonina		II	Theta 4 Hz- 8 Hz
Dopamina		III	Alfa 9 Hz- 14 Hz
Oxitocina		IV	Beta 15 Hz- 30 Hz

Tabla 4: Jesús Gilberto Concepción (2015).

ANEXO III

APROXIMACIONES DE HUCKEL PARA EL ETILENO Y EL BUTADIENO

ETILENO:

1. Determinación de la energía de cada OM del etileno, así como la total π del sistema utilizando el método de Huckel.

Cada orbital molecular tendrá la forma de:

$$\psi_i = c_{i1}\phi_1 + c_{i2}\phi_2 \quad \text{Ecuación I}$$

La ecuación de Schrödinger de cada OM tendrá la forma:

$$\hat{h} \psi_i = E_i \psi_i$$

Los coeficientes que deseamos son esos por los cuales la energía será mínima, esto es,

$$\frac{\partial E_i}{\partial c_{i1}} = \frac{\partial E_i}{\partial c_{i2}} = 0$$

Usando ψ_i como fue dado en la ecuación 1, en la ecuación de Schrödinger, multiplicando el miembro izquierdo por ψ_i se obtiene:

$$\int \psi_i \hat{h} \psi_i d\tau = E_i \int \psi_i^2 d\tau, \text{ esto es,}$$

$$\int (c_{i1}\phi_1 + c_{i2}\phi_2) \hat{h} (c_{i1}\phi_1 + c_{i2}\phi_2) d\tau = E_i \int (c_{i1}\phi_1 + c_{i2}\phi_2)^2 d\tau$$

Ahora podemos definir lo siguiente:

$$H_{ij} \equiv \int \phi_i \hat{h} \phi_j d\tau$$

$$S_{ij} \equiv \int \phi_i \phi_j d\tau$$

Note que no solo $S_{ij} = S_{ji}$ pero también, por las propiedades del operador, $H_{ij} = H_{ji}$.

Sustituyendo esto en la expresión de arriba y simplificando, obtenemos

$$c_{11}^2(H_{11} - E_i S_{11}) + 2c_{11}c_{12}(H_{12} - E_i S_{12}) + c_{12}^2(H_{22} - E_i S_{22}) = 0 \quad \text{Ecuación II}$$

Ahora, como los términos H y S no dependen de los coeficientes c , pero la energía E si, debemos diferenciar la ecuación 2 con respecto a c_{11} y c_{12} :

$$2c_{11}(H_{11} - E_i S_{11}) - c_{11}^2 S_{11} \frac{\partial E_i}{\partial c_{11}} + 2c_{12}(H_{12} - E_i S_{12}) - 2c_{11}c_{12}S_{12} \frac{\partial E_i}{\partial c_{11}} - c_{12}^2 S_{22} \frac{\partial E_i}{\partial c_{11}} = 0$$

$$-c_{11}^2 S_{11} \frac{\partial E_i}{\partial c_{12}} + 2c_{11}(H_{12} - E_i S_{12}) - 2c_{11}c_{12}S_{12} \frac{\partial E_i}{\partial c_{12}} + 2c_{12}(H_{22} - E_i S_{22}) - c_{12}^2 S_{22} \frac{\partial E_i}{\partial c_{12}} = 0$$

$$\frac{\partial E_i}{\partial c_{11}} = \frac{\partial E_i}{\partial c_{12}} = 0$$

Desde que especificamos que,

$$2c_{11}(H_{11} - E_i S_{11}) - c_{11}^2 S_{11} \frac{\partial E_i}{\partial c_{11}} + 2c_{12}(H_{12} - E_i S_{12}) - 2c_{11}c_{12}S_{12} \frac{\partial E_i}{\partial c_{11}} - c_{12}^2 S_{22} \frac{\partial E_i}{\partial c_{11}} = 0$$

$$-c_{11}^2 S_{11} \frac{\partial E_i}{\partial c_{12}} + 2c_{11}(H_{12} - E_i S_{12}) - 2c_{11}c_{12}S_{12} \frac{\partial E_i}{\partial c_{12}} + 2c_{12}(H_{22} - E_i S_{22}) - c_{12}^2 S_{22} \frac{\partial E_i}{\partial c_{12}} = 0$$

Ecuación III a

$$c_{11}(H_{12} - E_i S_{12}) + c_{12}(H_{22} - E_i S_{22}) = 0 \quad \text{Ecuación III b}$$

Las ecuaciones 3a y 3b nos llevan a una ecuación determinante,

$$\begin{vmatrix} H_{11} - E_i S_{11} & H_{12} - E_i S_{12} \\ H_{12} - E_i S_{12} & H_{22} - E_i S_{22} \end{vmatrix} = 0 \quad \text{La cual luego se convierte en}$$

$$(H_{11} - E_i S_{11})(H_{22} - E_i S_{22}) - (H_{12} - E_i S_{12})^2 = 0 \quad \text{Ecuación IV}$$

Se definen a continuación las siguientes cantidades, llamadas *aproximaciones de Huckel*

Para todo i , $H_{ii} \equiv \alpha$ y $S_{ii} \equiv 1$.

Para todo $i \neq j$, $S_{ij} \equiv 0$.

Para i y j en donde $|i - j| = 1$, $H_{ij} \equiv \beta$; para los demás i y j , $H_{ij} \equiv 0$.

Entonces, la ecuación 3 se convierte en

$$c_{11}(\alpha - E_i) + c_{12}\beta = 0 \quad \text{Ecuación Va}$$

$$c_{11}\beta + c_{12}(\alpha - E_i) = 0 \quad \text{Ecuación Vb}$$

Y la ecuación 4 se convierte en

$$(\alpha - E_i)^2 - \beta^2 = 0 \Rightarrow \alpha - E_i = \pm \beta \Rightarrow E_i = \alpha \pm \beta$$

Permitiendo $E_1 = \alpha + \beta$ y sustituyendo en la ecuación 5a, obtenemos:

$$c_{11}(\alpha - (\alpha + \beta)) + c_{12}\beta = 0 \Rightarrow -c_{11}\beta + c_{12}\beta = 0 \Rightarrow c_{11} = c_{12}$$

Similarmente, podemos determinar que $c_{21} = -c_{22}$. Si aplicamos la condición de

normalización $\int \psi^2 d\tau = 1$ a $\psi_1 = c_1\phi_1 + c_1\phi_2$, obtenemos lo siguiente:

$$\int (c_1\phi_1 + c_1\phi_2)^2 d\tau = 1$$

$$c_1^2 \left(\int \phi_1^2 d\tau + 2 \int \phi_1\phi_2 d\tau + \int \phi_2^2 d\tau \right) = 1$$

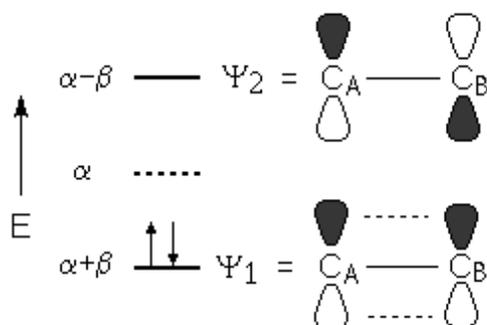
Ahora, por definición $\int \phi_i^2 d\tau = 1$ y $\int \phi_i\phi_j d\tau = 0$, por consiguiente $c_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}$ y los dos OM π de Huckel para el etileno son:

$$\psi_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_1' + \psi_2') \quad \text{Con } E_1 = \alpha + \beta \quad \text{y}$$

Energía

$$\psi_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_1' - \psi_2') \quad \text{Con } E_2 = \alpha - \beta$$

Energía



BUTADIENO (SIMPLIFICADO):

El determinante secular simplificado es:

$$\begin{vmatrix} \alpha - E & \beta & 0 & 0 \\ \beta & \alpha - E & \beta & 0 \\ 0 & \beta & \alpha - E & \beta \\ 0 & 0 & \beta & \alpha - E \end{vmatrix} = 0$$

Desarrollando el determinante y simplificando:

$$(\alpha - E)^4 - 3(\alpha - E)^2 \beta^2 + \beta^4 = 0$$

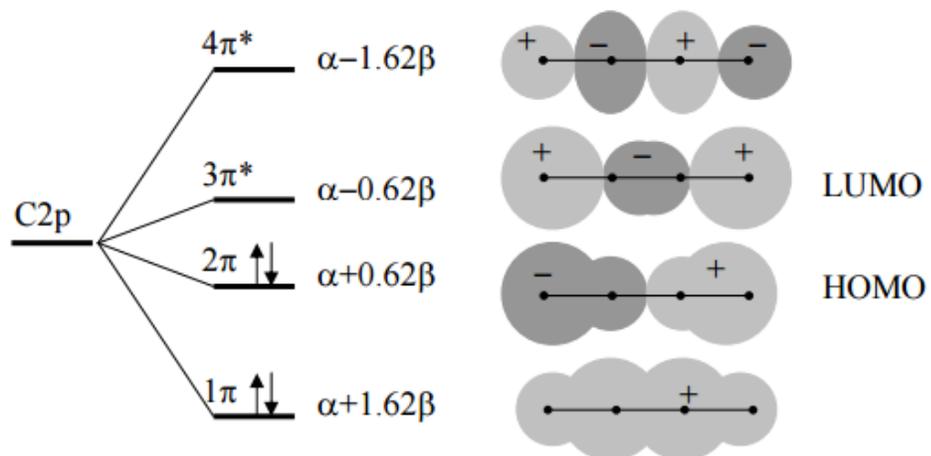
Haciendo $x = (\alpha - E)^2 / \beta^2$ queda: $x^2 - 3x + 1 = 0$

Las soluciones son: $x^2 = 2.62$ y $x^2 = 0.38$. Sustituyendo en la definición de x .

$$E = \alpha \pm 1.62\beta$$

$$E = \alpha \pm 0.62\beta$$

Se obtienen cuatro niveles de energía de los orbitales π del Butadieno.



Tomado de: https://en.wikipedia.org/wiki/H%C3%BCckel_method y de <https://mse.gist.ac.kr/~modeling/lecture2010spring/huckel.pdf>

ANEXO IV

**TRABAJOS HECHOS POR J. GILBERTO CONCEPCIÓN EN 'SYMMETRY
DYNAMICS IN LEADERSHIP AND MANAGEMENT' (2006).**

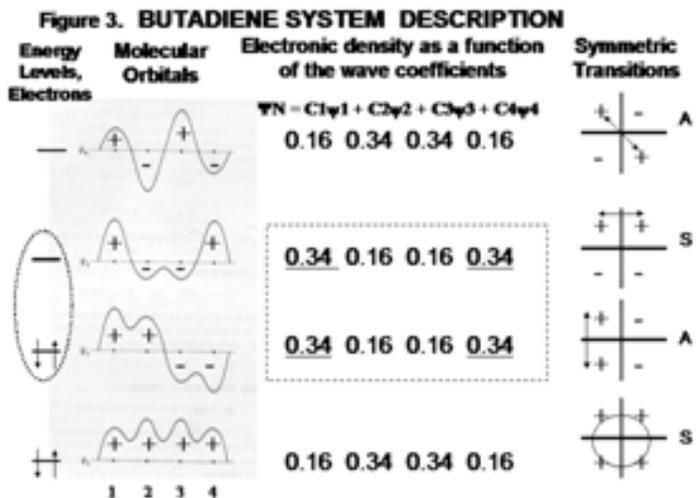
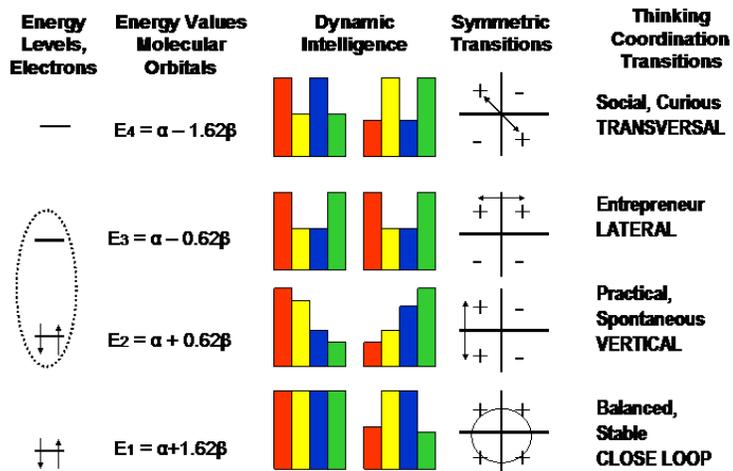


Figure 4. Spin dynamics Leadership and Management combinations



ANEXO V

EL PROGRAMA SHMO

DESCRIPCIÓN Y GUÍA DE USO BÁSICO

EL PROGRAMA SHMO

SHMO es un programa interactivo para realizar cálculos para estructuras electrónicas mediante las aproximaciones sencillas de Huckel hecho por A. Rauk (Wiley Interscience, 2001). SHMO es diseñado como un recurso educativo gratuito. Además de los cálculos de Huckel, permite cambios sencillos de electronegatividad de orbitales (Integrales de Coulomb, *alfa*) y valores de interacción intrínseca de orbitales (Integrales de resonancia, *beta*) para ilustrar los efectos de interacciones a energía de orbitales moleculares, diferencias de energía de orbitales y solapamientos de las energías de orbitales resultantes y sus polarizaciones.

Al comenzar el programa se obtiene la siguiente ventana:

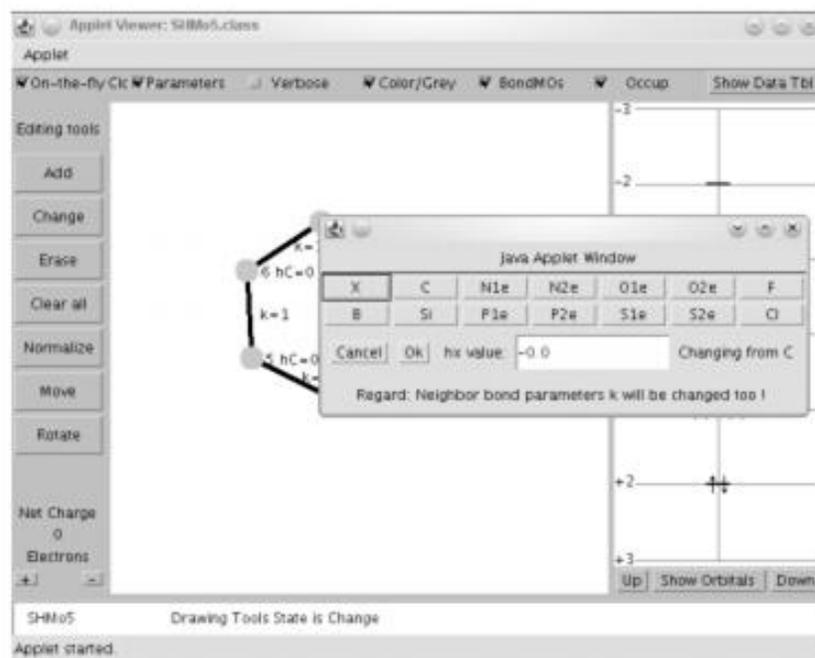
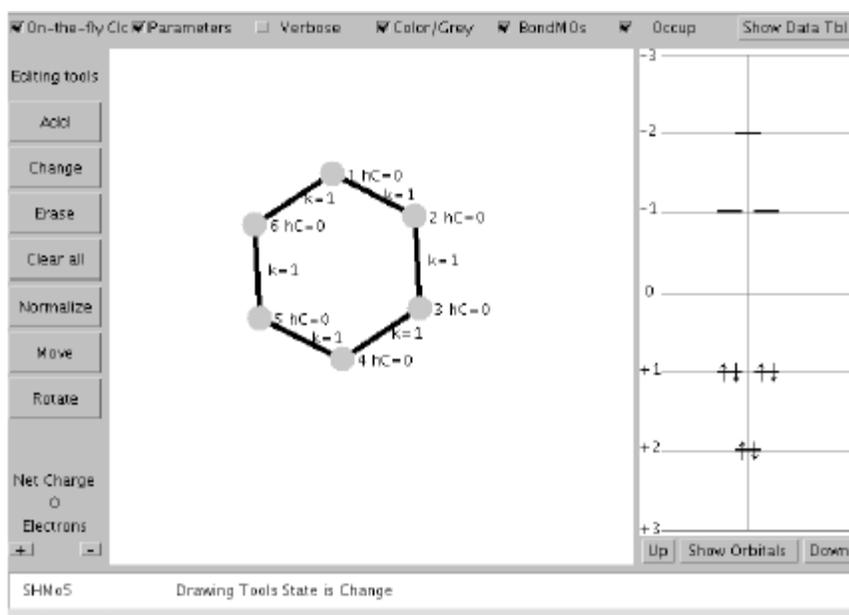


- En la esquina inferior derecha se muestra el estado en que está el programa. (Drawing Tools State is Add) significa que se pueden añadir átomos y enlaces.
- Haga clic en la ventana central para añadir un átomo o clic y arrastrar para crear un enlace.
- El programa recalcula automáticamente el determinante secular y lo resuelve mostrando el esquema de orbitales en la parte derecha.
- Para ver los resultados detallados pulse en Show Data Tbl.

- Si pulsa en Show Orbitals se muestra una representación esquemática de los orbitales moleculares.

Para construir una molécula con heteroátomos (efecto inductivo) en SHMO:

- Se construye la molécula con carbonos.
- Se pulsa en Change.
- En la parte inferior debe aparecer el mensaje Drawing Tools State is Change.
- Se selecciona un átomo y en la ventana que aparece se elije el tipo adecuado.
- Compruebe que el valor de hX es el correcto y pulse Ok.



Tomado de: <http://www.ucalgary.ca/rauk/shmo>

ANEXO VI

GRÁFICOS ADICIONALES

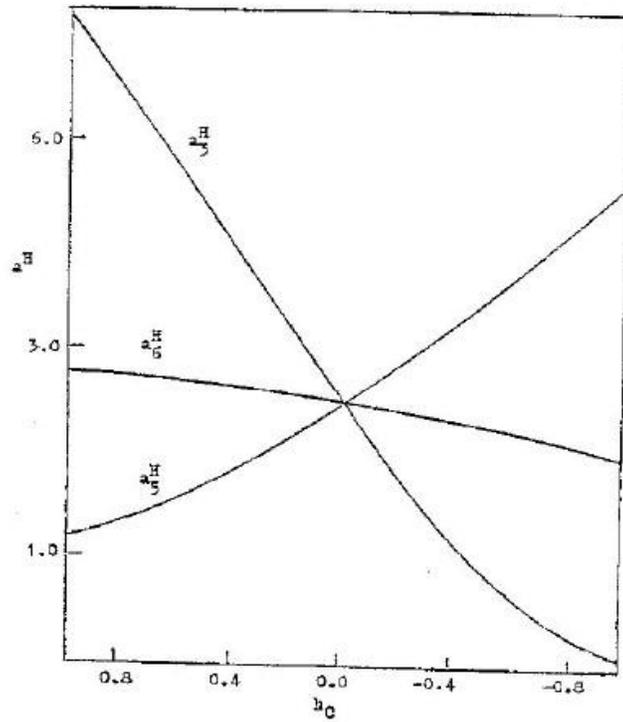


Gráfico A. Variación aH usando Teoría de Huckel en Radicales anionicos de 1,4 Benzoquinonas. (J. G. Concepción ,1982)

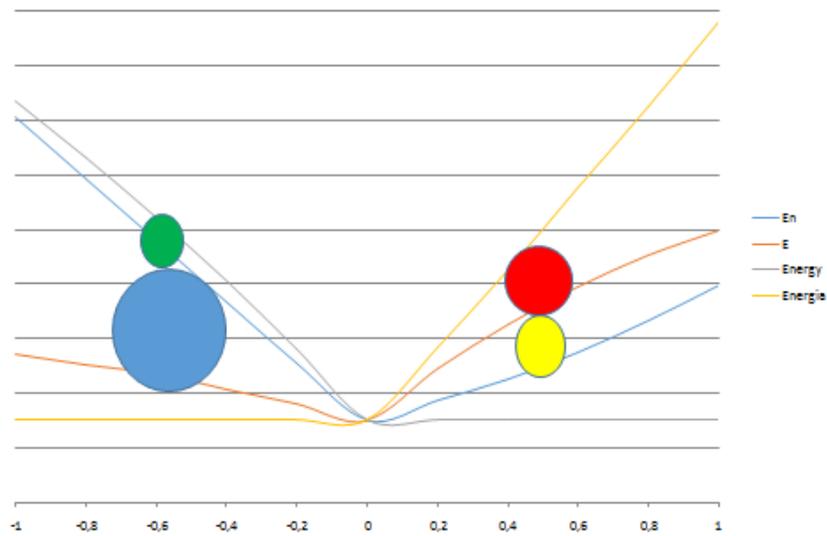


Gráfico B. Áreas de Energía donde podría haber mayor actividad **ANALGESICA Y ANESTESICA, TRANQUILIZANTE, MOTIVANTE, EUFORICA.** (De la Cruz, Yépez y Concepción, 2016).

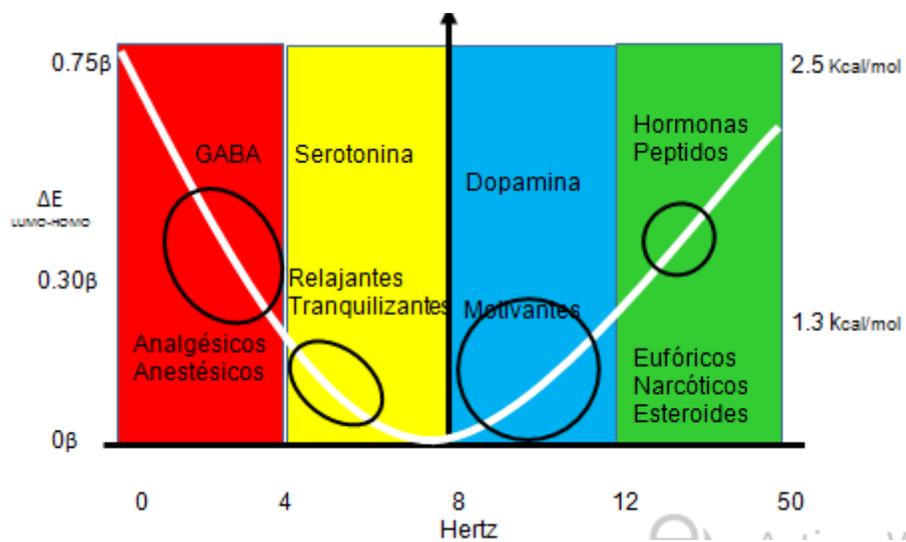
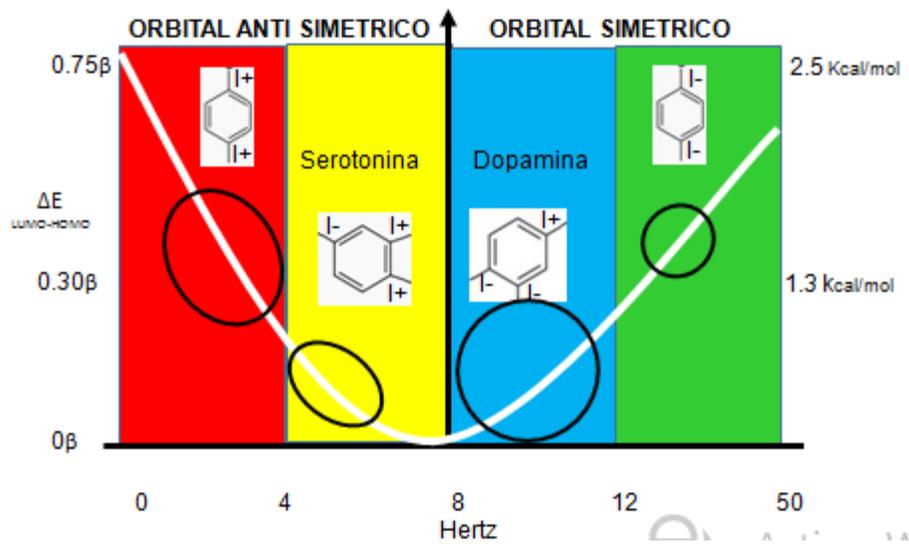


Gráfico C. Lo mágico del Benceno basado en la simetría de sus orbitales. Neurotransmisores y neuromedicamentos. (J. G. Concepción, 2016).

VARIACION EN ENERGIAS ENTRE LOS ESTADOS LUMO-HOMO EN UNIDADES β , DE MEDICAMENTOS UTILIZADOS PARA ESTABILIZAR LOS DIFERENTES NIVELES ENERGETICOS DEL CEREBRO. ENERGIAS MO-HUCKEL ($E=\alpha \pm \beta$)

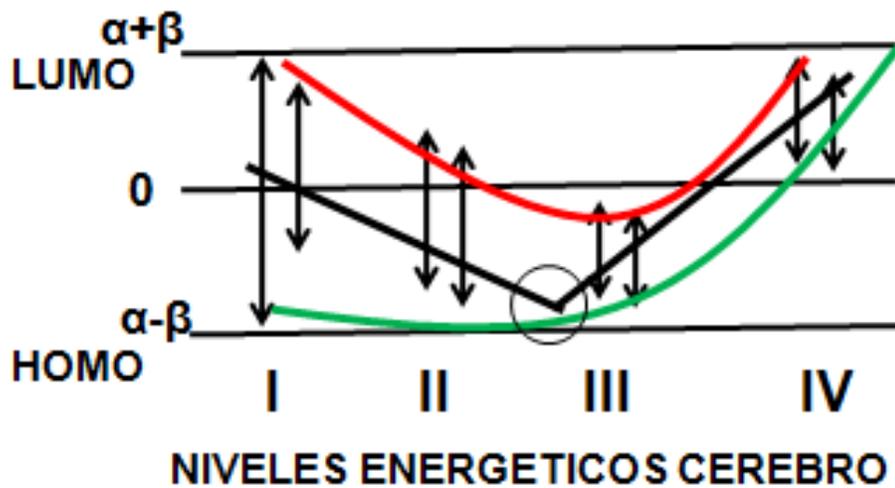


Gráfico D. Predicciones de J. G. Concepción del resultado de las gráficas del nuevo modelo cerebral.

ANEXO VII

ECUACIONES

Ecuaciones referentes a las aproximaciones de Huckel:

$$\pi^\mu = \sum_{i=1}^N c_i^\mu p_z^i \quad (1)$$

$$H_{ij} = \int p_z^i \hat{H} p_z^j d\tau \quad S_{ij} = \int p_z^i p_z^j d\tau \quad (2)$$

$$S_{ij} = \begin{cases} 1 & i=j \\ 0 & i \neq j \end{cases} \quad (3)$$

$$\mathbf{H} \cdot \mathbf{c}^\alpha = E_\alpha \mathbf{S} \cdot \mathbf{c}^\alpha \quad \Rightarrow \quad \mathbf{H} \cdot \mathbf{c}^\mu = E_\mu \mathbf{c}^\mu \quad (4)$$

$$H_{ii} = \int p_z^i \hat{H} p_z^i d\tau \equiv \alpha \quad (5)$$

$$H_{ij} = \int p_z^i \hat{H} p_z^j d\tau \equiv \beta \quad i, j \text{ neighbors} \quad (6)$$

$$E_{tot} = \sum_{i=1}^N E_i \quad (7)$$

Ecuación de Hammet para la determinación del efecto inductivo de un sustituyente X:

$$\sigma_X = \log \frac{K_X}{K_H} = pK_{a(H)} - pK_{a(X)}$$

$\sigma_X > 0$: atrayentes de electrones

$\sigma_X < 0$: dadores de electrones

(8)

Ecuaciones (1-7) tomadas de: <https://ocw.mit.edu/courses/.../5.../lecture31.pdf>
 Ecuación 8 tomada de: Delgado (2003). Introducción a la Química Terapéutica.

ANEXO VIII

GLOSARIO

GLOSARIO

Aniones Radicales: Son especies químicas únicas que se generan mediante la adición de un electrón a una molécula neutra.

Aminoácidos: es una molécula orgánica con un grupo amino, $-NH_2$ y un grupo carboxilo, $-COOH$. Son compuestos orgánicos que se combinan para formar proteínas.

Axón: es una prolongación de las neuronas especializadas en conducir el impulso nervioso desde el cuerpo celular hacia otra célula.

Acetilcolina: es un neurotransmisor que está ampliamente distribuida en el sistema nervioso central, particularmente implicada en los circuitos de la memoria.

Amina: compuesto orgánico que se consideran como derivados del amoníaco y resultan de la sustitución de uno o varios de los hidrógenos de la molécula de amoníaco por otros sustituyentes o radicales.

Bomba sodio/potasio: es una proteína integral de membrana fundamental en la fisiología de las células que se encuentra en todas nuestras membranas celulares. Su función es el transporte de los iones inorgánicos más importantes en biología, el sodio y el potasio, entre el medio extracelular y el citoplasma, proceso fundamental en todo el reino animal.

Cuerpo caloso: es aquel que conecta ambos hemisferios cerebrales y se ubica en el fondo de la fisura longitudinal del cerebro.

Catión Radical: Es aquel que se forma cuando una molécula en fase gaseosa es sometida a la ionización electrónica y un electrón es abstraído por un electrón en el haz de electrones. Esta especie representa el ión molecular o ion padre.

Ciclooctatetraeno: es un derivado insaturado del ciclooctano, con la fórmula molecular C_8H_8 . Este hidrocarburo poli-insaturado es un líquido incoloro tirando a amarillo claro inflamable a temperatura ambiente.

Catecolaminas: son moléculas producidas por un aminoácido, la tirosina, que actúa como una hormona o neurotransmisor.

Cuerpo estriado: es una estructura nerviosa que se encuentra en el cerebro, justo debajo de la corteza cerebral. Interviene en la ejecución de nuestros movimientos, de forma más precisa en la motricidad automática, así como en el control del dolor.

Células Cromafines: son aquellas que almacenan una gran cantidad de hormonas de la familia de las catecolaminas: adrenalina, dopamina y noradrenalina. Éstas deben su nombre a su reacción con las sales de cromo, las cuales se colorean en marrón en su presencia.

Distribución Boltzman: es una distribución de probabilidad de la energía de las partículas. Se asume que un número ilimitado de partículas pueden ocupar cualquier estado de energía.

Dentritas: son prolongaciones protoplásmicas ramificadas, bastante cortas de la neurona dedicadas principalmente a la recepción de estímulos y, secundariamente, a la alimentación celular.

Despolarización: es una disminución del valor absoluto del potencial de membrana en una neurona.

Eigenvector: Son los vectores no nulos que, cuando son transformados por el operador, dan lugar a un múltiplo escalar de sí mismos, con lo que no cambian su dirección. Este escalar recibe el nombre valor propio, autovalor, valor característico o eigenvalor. A menudo, una transformación queda completamente determinada por sus vectores propios y valores propios.

Enlace π : Se forman entre dos átomos de un compuesto covalente, debido a la superposición directa o frontal de los orbitales; es más fuerte y determina la geometría

geometría de la molécula molécula. Dos átomos enlazados enlazados comparten comparten un par de electrones de enlace, aportando cada uno de ellos, un electrón al par electrónico de enlace.

Enlace π : Se forma después del enlace sigma; es el segundo o tercer enlace formado entre dos átomos, debido a la superposición lateral de los orbitales p. Sus electrones se encuentran en constante movimiento.

Epinefrina: es una hormona que es químicamente idéntica a la adrenalina producida por el cuerpo, y ambos nombres se usan indistintamente. Cuando se produce naturalmente en el cuerpo, ayuda a responder de manera efectiva a corto plazo al estrés.

Exocitosis: Es un mecanismo mediante el cual, las células liberan hormonas, como la insulina, enzimas digestivas y neurotransmisores. Estos últimos son fundamentales para llevar a cabo la transmisión del impulso nervioso.

Fenilalanina: es un aminoácido esencial que tiene un papel importante en el sistema nervioso, sobretodo como estimulante de la glándula tiroides, atenuando el dolor y participando en la síntesis de ciertos neurotransmisores.

GABA: El ácido gamma amino butírico, GABA, es el neurotransmisor inhibitorio más importante del cerebro. Desempeña el papel principal en la reducción de excitabilidad neuronal a lo largo del sistema nervioso.

Glicina: Es un aminoácido utilizado por el sistema nervioso y funciona como un neurotransmisor inhibitor, por lo que puede ser beneficiosa en el tratamiento de la esquizofrenia.

Glutamato: es el principal neurotransmisor excitador del sistema nervioso central y actúa tanto a través de receptores acoplados a canales iónicos, como a receptores acoplados a proteínas. La activación de estos receptores es la responsable de la transmisión sináptica excitadora y de muchas formas de plasticidad sináptica que están implicadas en los procesos del aprendizaje y de la memoria.

Hamiltoniano H : Tiene dos significados distintos, aunque relacionados. En mecánica clásica, es una función que describe el estado de un sistema mecánico en términos de variables posición y momento, y es la base para la reformulación de la mecánica clásica conocida como mecánica hamiltoniana. En mecánica cuántica, el operador Hamiltoniano es el correspondiente al observable "energía".

HOMO: Es el orbital molecular ocupado de más energía, de sus siglas en inglés Highest Occupied Molecular Orbital.

Homeostasis: es la capacidad del organismo para presentar una situación físico-química característica y constante dentro de ciertos límites. Para ello, el cuerpo o el organismo movilizan los diferentes sistemas, autorregulación, tales como el sistema nervioso central, el sistema respiratorio y otros para mantener constante las condiciones de la vida.

Inhibición de neurotransmisores: Suspender o impedir transitoriamente una función o actividad de un neurotransmisor.

Inactivación del neurotransmisor: Inmediatamente que se produce la comunicación postsináptica ocurre la inactivación del neurotransmisor. El mecanismo de inactivación más importante es la recaptación presináptica. Esto ocurre gracias a los transportadores de membrana quienes se encargan de ubicarlos nuevamente en el espacio presináptico.

LUMO: Es el orbital molecular no ocupado de más baja energía, de sus siglas en inglés Lowest Unoccupied Molecular Orbital.

Matriz secular: En la física cuántica es la matriz que representa la evolución de un operador a través del tiempo.

Mecánica cuántica: es la parte de la física que estudia el movimiento de las partículas muy pequeñas o microobjetos. El concepto de partícula "muy pequeña" atiende al tamaño en el cual comienzan a notarse efectos como la imposibilidad de conocer con exactitud infinita y a la vez la posición y la velocidad de una partícula, entre otros. A tales efectos suele denominárseles "efectos cuánticos". Así, la Mecánica cuántica es la que rige el movimiento de sistemas en los cuales los efectos cuánticos sean relevantes.

Mimetizar: Adoptar la apariencia de los seres u objetos del entorno.

Momento magnético: de un imán es una cantidad que determina la fuerza que el imán puede ejercer sobre las corrientes eléctricas y el par que un campo **magnético** ejerce sobre ellas. Un bucle de corriente eléctrica, un imán de barra, un electrón, una molécula y un planeta, todos tienen momentos magnéticos.

Neurociencias: son un conjunto de disciplinas científicas que estudian la estructura, la función, el desarrollo de la bioquímica, la farmacología, y la patología del sistema nervioso y de cómo sus diferentes elementos interactúan, dando lugar a las bases biológicas de la conducta.

Nitrosaminas: son compuestos químicos cuya estructura química es $R1N-N=O$, algunas de las cuales son carcinógenas.

Ortonormal: Un conjunto de vectores es ortonormal si es a la vez un conjunto ortogonal y la norma de cada uno de sus vectores es igual a 1. Ortogonal refiriéndose a una generalización de la noción geométrica de perpendicularidad.

Orbitales moleculares: son regiones del espacio que contienen la densidad electrónica definida por, funciones matemáticas, que describen el comportamiento ondulatorio que pueden tener los electrones en las moléculas. Estas funciones pueden usarse para calcular propiedades químicas y físicas tales como la probabilidad de encontrar un electrón en una región del espacio.

Orbitales degenerados: grupo de orbitales moleculares con misma energía. este degeneramiento puede a veces ser "elevado" por campos eléctricos o magnéticos externos.

Orbital de enlace u orbital enlazante: es aquel orbital molecular caracterizado porque hay una densidad electrónica importante entre los núcleos atómicos, esto es, no hay nodos perpendiculares al eje internuclear. Según el método de combinación lineal de orbitales atómicos, un orbital enlazante se forma mediante la interferencia constructiva de dos orbitales atómicos de simetría apropiada. De esta forma, se obtiene un orbital con menor energía que cualquiera de los dos orbitales atómicos originales, lo que favorece la formación del enlace químico entre los dos átomos.

Orbital de antienlace: es aquel orbital molecular caracterizado porque hay una densidad electrónica pequeña entre los núcleos atómicos, existiendo uno o más nodos perpendiculares al eje internuclear. Según el método de combinación lineal de orbitales atómicos, un orbital antienlazante se forma mediante la interferencia destructiva de dos orbitales atómicos de simetría apropiada. De esta forma, se obtiene un orbital con mayor energía que cualquiera de los dos orbitales atómicos originales, lo que desfavorece la formación del enlace químico entre los dos átomos.

Orbitales σ enlazantes: Son los orbitales atómicos s y p, que se combinan entre sí de todas las maneras posibles, s-s, p-p, s-p, p-s. Poseen enlaces sencillos, y una geometría cilíndrica en torno al eje del enlace.

Orbitales π enlazantes: Son aquellos que coordinan los orbitales atómicos p, perpendiculares al eje. Poseen electrones muy deslocalizados que interaccionan con gran facilidad.

Orbitales σ^* antienlazantes: se tratan de orbitales de mayor energía que en los orbitales enlazantes.

Orbitales π^* antienlazantes: Se trata de orbitales π de gran energía.

Orbital simétrico: o enlazante tiene menor energía que los orbitales moleculares originales.

Orbitales antisimétricos: o antienlazantes mayor energía que los orbitales moleculares originales.

Proteínas: son biomoléculas formadas por cadenas lineales de aminoácidos.

Péptidos: son un tipo de moléculas formadas por la unión de varios aminoácidos mediante enlaces peptídicos. Los péptidos, al igual que las proteínas, están presentes en la naturaleza y son responsables de un gran número de funciones, muchas de las cuales todavía no se conocen.

Radical: es una especie química, orgánica o inorgánica, caracterizada por poseer uno o más electrones desapareados. Se forma en el intermedio de reacciones químicas, a partir

de la ruptura homolítica de una molécula y, en general, es extremadamente inestable y, por tanto, con gran poder reactivo y de vida media muy corta, milisegundos.

Resonancia spin electrónica: Es una técnica con la que es posible analizar especies radicalarias y gran cantidad de compuestos organometálicos y de complejos de metales de transición.

Simetría: Correspondencia de posición, forma y tamaño, respecto a un punto, una línea o un plano, de los elementos de un conjunto o de dos o más conjuntos de elementos entre sí.

Simetría molecular: describe la simetría de las moléculas y utiliza este criterio para su clasificación. La simetría molecular es un concepto fundamental en química, pues muchas de las propiedades químicas de una molécula, como su momento dipolar y las transiciones espectroscópicas permitidas, basadas en reglas de selección como la regla de Laporte, pueden predecirse o ser explicadas a partir de la simetría de la molécula.

Simetría de reflexión: Es una línea invisible volteada que produce dos imágenes en un espejo a cada lado de la línea. Un elemento posee simetría de reflexión si una línea se puede dibujar hacia su centro de tal manera que las dos mitades resultantes se reflejan mutuamente.

Solapamiento: Es aquel que ocurre cuando dos átomos se aproximan uno a otro hasta que el orbital de uno de ellos comparte una cierta amplitud con el orbital del otro.

Sustituyente: es un heteroátomo, grupo funcional o grupo alquilo, que ocupa el lugar de un átomo de hidrógeno de un hidrocarburo o de un grupo saliente de un compuesto orgánico en general.

Sustancia negra: es una estructura del cerebro se encuentra en el cerebro medio que juega un papel importante en la recompensa, la adicción y el movimiento. Sustancia Negra en latín significa "sustancia negro", lo que refleja el hecho de que las partes de la sustancia negra aparecen más oscuras que las áreas circundantes debido a los altos niveles de neuromelanina en las neuronas dopaminérgicas.

Tirosina: es uno de los 20 aminoácidos que forman las proteínas. Se clasifica como un aminoácido no esencial en los mamíferos ya que su síntesis se produce a partir de la hidroxilación de otro aminoácido: la fenilalanina.

Triptofano: es un aminoácido esencial en la nutrición humana. Es uno de los 20 aminoácidos incluidos en el código genético, codón UGG. Se clasifica entre los aminoácidos apolares, también llamados hidrófobos. Es esencial para promover la liberación del neurotransmisor serotonina, involucrado en la regulación del sueño y el placer.

Uniones GAP o de hendidura: son ciertas clases de conexiones que se observan a veces entre las células en tejidos animales. Son estructuras dinámicas que se abren y se cierran.

María Alfonsina Luna Torres

Sustentante

Yissel Familia Martínez

Sustentante

Dr. Jesús Gilberto Concepción

Asesor Temático

Ing. Milagros P. López

Asesora Metodológica

Licda. Grace Báez

Jurado

Ing. Maribel Espinosa

Jurado

Licda. Elida Zerpa

Jurado

Calificación: _____

Fecha: _____

Ing. Doris Peña

Directora de la Escuela de Química