



**Congreso Argentino de Fisicoquímica y
Química Inorgánica - La Plata 2021**

En memoria del Profesor
Dr. Alejandro Jorge Arvia
14/01/1928-22/04/2021

Comité Organizador

Presidente:

- Ing. Liliana M. Gassa

Vicepresidente:

- Dra. María Eugenia Tucceri

Secretaria:

- Dra. María Paula Badenes

Prosecretaria:

- Dra. Larisa Bracco

Tesorera:

- Dra. Carolina Vericat

Vocales:

- Dra. Carolina Lorente
- Dr. Ezequiel Wolcan
- Lic. Claudia Chacón Gil
- Lic. Valentín Villarreal
- Lic. Yoskiel Lorca
- Lic. Paolo Zucchini
- Dr. Fabricio Ragone
- Mag. Wilfred Espinosa
- Lic. Yeljair Monascal

Comité Científico

Presidente:

- Dra. Florencia Fagalde

Delegación UNS, Bahía Blanca:

- Dr. Juan Manuel Sieben
- Dra. Graciela Pilar Zanini
- Dra. Mariana Alvarez

Delegación CONEA, CAC – Buenos Aires:

- Dra. Verónica Lombardo
- Dr. Nahuel Montesinos

Delegación UNC, Córdoba:

- Dra. Belén Blanco
- Dr. Sergio Dassie
- Dr. Gustavo Pino

Delegación UNNE, Corrientes:

- Dra. Maria Fernanda Zalazar
- Dr. Emilio Luis Angelina (UNNE)

Delegación UNLP, La Plata:

- Dra. Andrea Lorena Picone
- Dra. Rosana Romano
- Dra. Melina Cozzarin
- Dr. Gustavo Ruiz

Delegación UNRC, Rio IV:

- Dr. Walter A. Massad
- Dr. Mariano Correa
- Dr. Rodrigo Palacios

Delegación UNR, Rosario, Santa Fé:

- Dr. Sebastián Bellú
- Dr. Juan Carlos Gonzalez

Delegación Santa Fé

- Dra. Claudia Neyertz

Delegación UNSL, San Luis:

- Dr. Germán Gómez
- Dra. Griselda Narda

Delegación UNSE, Santiago del Estero:

- Dra. Ana Ledesma
- Dra. Valentina Rey

Delegación Tucumán:

- Dra. Aída Ben Altabef
- Dr. Mauricio Cattaneo



XXII CONGRESO ARGENTINO DE FISICOQUÍMICA Y QUÍMICA INORGÁNICA LA PLATA 2021

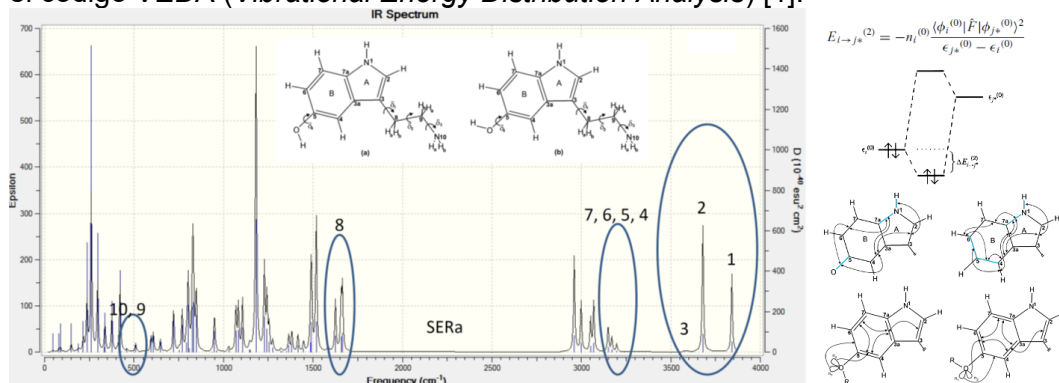
ANÁLISIS DE ORBITALES NATURALES DE ENLACE EN EL ESTUDIO VIBRACIONAL DE SEROTONINA

Rosana María Lobayan¹, Natalia Costilla¹, Erika Natalia Bentz¹ y María Celia Pérez Schmit¹.

¹Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales y Agrimensura, Universidad Nacional del Nordeste, Avda. Libertad 5300, 3400; rlobayan@unne.edu.ar

Introducción: Serotonina (5-hydroxytryptamina, SER) es un neurotransmisor que afecta muchos diferentes procesos en el cuerpo humano. Su estudio espectroscópico vibracional reviste gran interés como parte de la familia de indoles bajo estudio, en particular por su capacidad captadora de radicales libres. La descripción de los efectos de deslocalización de carga subyacentes a las variaciones en los espectros constituye el objetivo central en ésta presentación que incluye un estudio de espectros de Melatonina y Triptamina.

Resultados: Estudiamos las energías de estabilización de segundo orden obtenidas mediante un análisis de Orbitales Naturales de Enlace (NBO, por sus siglas en inglés) y los espectros infrarrojo y Raman. El abordaje teórico se realiza a nivel DFT/B3LYP/6-311++G(d,p), asignando bandas mediante la distribución de Energía Potencial utilizando el código VEDA (*Vibrational Energy Distribution Analysis*) [1].



Conclusiones: Nuestros resultados muestran que los mecanismos de deslocalización de carga descritos mediante el análisis NBO permiten describir los cambios observados en los espectros, y llevan a identificar por ejemplo los efectos del grupo OH [2], conduciendo entonces a la posibilidad de extraer desde los resultados espectroscópicos sutil información conformacional. Además, dados los avances en el conocimiento de la relación entre efectos de deslocalización y la reactividad frente a radicales libres, éste trabajo también muestra la posibilidad de extraer de los espectros vibracionales información relativa a la reactividad química de indoles en general.

Referencias:

- 1) Michał H. Jamróz, *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, **2013**, 114, 220–230.
- 2) R. M. Lobayan, M. C. Pérez Schmit. *J Mol Graph Model*, **2018**, 80, 224-237.