



# **Universidad Nacional Mayor de San Marcos**

**Universidad del Perú. Decana de América**  
**Facultad de Química e Ingeniería Química**  
**Escuela Profesional de Química**

## **Fisicoquímica del neurotransmisor dopamina y su precursor L-DOPA utilizando métodos teóricos y experimentales**

### **TESIS**

Para optar el Título Profesional de Química

### **AUTOR**

Nancy Mariela CHALLAPA VELÁSQUEZ

### **ASESOR**

Aldo Javier GUZMÁN DUXTAN

Juan Zenón DÁVALOS PRADO

Lima, Perú

2018

## FISICOQUIMICA DEL NEUROTRANSMISOR DOPAMINA Y SU PRECURSOR L-DOPA UTILIZANDO MÉTODOS TEÓRICOS Y EXPERIMENTALES

**Autor:** CHALLAPA VELASQUEZ, NANCY MARIELA

**Asesor:** Dr. GUZMAN DUXTAN, ALDO JAVIER

**Co-Asesor:** Dr. DÁVALOS PRADO, JUAN ZENÓN

### RESUMEN

En el presente trabajo se han estudiado propiedades de estabilidad termodinámica y reactividad por transferencia protónica intrínsecas (en fase gas) del neurotransmisor dopamina y su precursor L-DOPA. Utilizando tanto métodos experimentales como teóricos (DFT y *ab initio*), determinamos:

- Computacionalmente: Entalpías de formación,  $\Delta_f H_m^0(g)$ , de las especies neutras estudiadas, empleando metodologías termoquímicas como Reacciones de atomización (a niveles G3 y G4) y Reacciones isodésmicas (B3LYP).
- Experimentalmente: Afinidad protónica *PA* y basicidad *GB* de la dopamina y la acidez (*GA*) de la L-DOPA; aplicando el Método Extendido de Cooks (EKCM) a los resultados obtenidos utilizando un espectrómetro de masas de triple cuadrupolo (MS-TQ) con fuente de ionización por electroespray (ESI). Las propiedades estructurales (incluyendo análisis poblacional) y energéticas de las especies consideradas fueron calculadas computacionalmente al nivel B3LYP; éstas reprodujeron bastante bien los valores experimentales obtenidos.

**Palabras claves:** Neurotransmisor, dopamina, L-DOPA, acidez, basicidad, afinidad protónica, MS-ESI, Método cinético extendido, DFT, B3LYP, G3-G4, cálculos computacionales.

# PHYSICAL CHEMISTRY PROPERTIES OF NEUROTRANSMITTER DOPAMINE AND ITS PRECURSOR L-DOPA USING EXPERIMENTAL AND THEORETICAL METHODS

**Author:** CHALLAPA VELASQUEZ, NANCY MARIELA

**Advisor:** Dr. GUZMAN DUXTAN, ALDO JAVIER

**CO-Advisor:** Dr. DAVALOS PRADO JUAN ZENON

## SUMMARY

In the present work, thermodynamic stability and intrinsic proton transfer reactivity (in gas phase) properties of the neurotransmitter dopamine and its precursor L-DOPA have been studied. Using both experimental and theoretical methods (DFT and *ab initio*), we determine:

- Computationally: Standard enthalpies of formation in the gas phase,  $\Delta_f H_m^0(g)$ , of the neutral species studied, using thermochemical methodologies such as atomization reactions (at G3 and G4 levels of theory) and isodesmic reactions (at B3LYP level).
- Experimentally: Proton affinity *PA* and basicity *GB* of dopamine and acidity (*GA*) of L-DOPA; applying the Extended Cook Method (EKCM) to the results obtained using a triple quadrupole mass spectrometer (TQ-MS) with an electrospray ionization source (ESI). The structural (including population analysis) and energetic properties of the species considered were calculated computationally at the B3LYP level; they reproduced very well the obtained values.

**Key words:** Neurotransmitter, dopamine, L-DOPA, acidity, basicity, proton affinity, MS-ESI, Extended Kinetic Method, DFT, B3LYP, G3-G4, computational calculations.