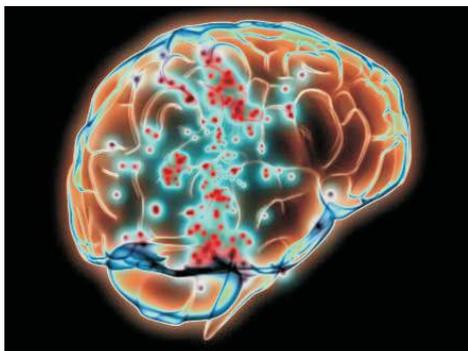


## Curso de Posgrado

# “COMPUESTOS CON ACTIVIDAD EN EL SISTEMA NERVIOSO CENTRAL. FENETILAMINAS E INDOLALQUILAMINAS: ANÁLISIS Y CÁLCULO”

Res. N° 0801/16- CD



### Profesores dictantes:

Rosana M. Lobayan (Coordinadora)  
Alicia B. Pomilio  
Arturo Vitale  
Erika Bentz

### Objetivos:

Proveer a interesados en el tema y a alumnos de Doctorado en las áreas de Física, Química y Biología, del conocimiento químico estructural y experimental sobre compuestos activos en el sistema nervioso central, como fenetilaminas e indolalquilaminas. Brindar los conceptos teóricos y herramientas necesarias para utilizar los métodos de Simulación Computacional en el desarrollo de sus temas de investigación

### Modalidad de enseñanza:

Clases teóricas y clases Teórico-prácticas.

### Programa:

Compuestos nitrogenados, naturales y sintéticos, con actividad sobre el sistema nervioso central: Familia de las fenetilaminas e Indolalquilaminas con actividad sobre el sistema nervioso central. Características estructurales. Espectros de resonancia magnética nuclear (RMN) de protones y de C-13 (1H-RMN y 13C-RMN). Tipo de acción según la estructura molecular. Efecto de la ciclación intramolecular. Conformaciones. Búsqueda de las subestructuras que originan la actividad biológica. Actividad serotoninérgica. Alucinógenos. Metodologías de análisis: Preparación de muestras; extracción en fase sólida. Cromatografía líquida de alta resolución: Teoría. Bombas de impulsión de solventes. Inyectores. Detectores. Columnas para HPLC. Desarrollo de métodos Aspectos cualitativos y cuantitativos de la desintegración radiactiva. Ley fundamental de la desintegración radiactiva. Instrumentos de medición de radiactividad. Propiedades generales de los detectores. Clasificación de los detectores. Radiotrazadores para estudios in vivo de compuestos bioactivos: Trazadores. Uso de los radioisótopos en diferentes procesos físico-químicos e Industriales. Aplicaciones en Biología, en diagnóstico médico y terapéuticas. Ejemplos de síntesis y uso de moléculas marcadas en estudios metabólicos. Triptaminas y fenetilaminas marcadas. La superficie de energía potencial: El modelo fundamental. Reactantes, productos y estados de transición: Puntos estacionarios. Frecuencias reales e imaginarias: Caracterizando puntos estacionarios en muchas dimensiones. El Hessiano y su diagonalización. La aproximación armónica. Masa reducida. Frecuencias vibracionales. Las frecuencias del amoníaco planar. Minimización de la energía: Encontrando y conectando puntos estacionarios. Métodos Steepest Descent y Newton-Rawson. Aplicación al potencial de Morse. Optimización global versus optimización local. Optimizando al CO. Comentarios prácticos con respecto a geometrías y optimizaciones. El problema del mínimo local, búsqueda conformacional y dinámica molecular. El problema de múltiples mínimos: Energía y Energía libre. Calculando la energía: Campos de fuerza de la mecánica molecular. Mecánica cuántica. El átomo de hidrógeno y la

aproximación de Born - Oppenheimer. La molécula H<sub>2</sub><sup>+</sup>. La aproximación orbital y el principio variacional. El espín del electrón y la ecuación de Schrödinger: RHF, ROHF, y UHF. El procedimiento de campo autoconsistente. Recomendaciones prácticas con respecto a cálculos RHF. Métodos semiempíricos. La energía de correlación. Teoría del Funcional de la Densidad (DFT). Energía versus Energía Libre. Propiedades: Propiedades moleculares y fase condensada. La densidad electrónica. El potencial electrostático. Moléculas en solución: Modelos de solvente implícito.

### Destinatarios del curso:

Alumnos de Doctorado en las áreas de Física, Química y Biología, y graduados en Carreras Afines interesados en el tema

### Fecha de Inicio:

**22/05/2017 – 09:00hs** – Aula Posgrado- FaCENA  
Días de dictado: del 22/05/2017 al 02/06/2017 de 09:00 a 17:00 hs

**Duración:** 60 horas presenciales teóricas-prácticas y 10 hs. de trabajos no presenciales.

**Cupos:** mínimo: 10 – máximo: 30

### Requisitos de aprobación:

70 % de asistencia a las clases  
Trabajo final aprobado.

**Arancel:** \$2.000,00.- Para alumnos de Doctorado \$1.300,00.-

### Inscripción mediante formulario online:

<http://exa.unne.edu.ar/postgrado/1/inscripcion/formulario.php>

(Se generará un archivo PDF que le servirá de comprobante de inscripción)

Secretaría de Investigación y Posgrado - FaCENA –  
2° Piso Edificio Central  
Av. Libertad 5400 - Campus  
Te: 0379 - 4473931 – int. 118  
Contacto: Mareva Schey  
[sip.cursos@comunidad.unne.edu.ar](mailto:sip.cursos@comunidad.unne.edu.ar)