

# MEMORIA DE INVESTIGACIÓN 2004 - 2005

**CURSO ACADÉMICO:** 2004 - 2005

**FACULTAD O ESCUELA:** FACULTAD DE FARMACIA

**DEPARTAMENTO:** QUÍMICA FÍSICA

**DIRECTOR:** D. OBIS DIONISIO CASTAÑO GONZÁLEZ

**ÁREAS DE CONOCIMIENTO:**

- QUÍMICA FÍSICA

## I. PERSONAL

### I.1 PERSONAL INVESTIGADOR

- ÁREA: QUÍMICA FÍSICA

#### CATEDRÁTICOS DE UNIVERSIDAD Y EMÉRITOS

Saiz García, Enrique  
Tarazona Lafarga, Pilar

#### CATEDRÁTICOS DE ESCUELA UNIVERSITARIA

Sánchez Jiménez, José M<sup>a</sup>

#### PROFESORES TITULARES DE UNIVERSIDAD

Castaño González, Obis Dionisio  
Echevarría Gorostidi, Gerardo  
Marín Noarbe, Dolores  
Mendicuti Madrid, Francisco  
Rodrigo López, M<sup>a</sup> Melia  
Teijeiro Ferreira, Carmen  
Valiente Martínez, Mercedes

#### PROFESORES TITULARES DE ESCUELA UNIVERSITARIA

Dolcet del Alamo, Cristina  
Vivas Arce, Eloisa

#### PROFESORES CONTRATADOS DOCTORES

Montalvo García, Gemma

#### PROFESORES ASOCIADOS

Gallego Castro, Javier Vicente  
Palmeiro Uriach, Raúl  
Rodríguez Laguna, M<sup>a</sup> Teresa

### I.2 PERSONAL ADMINISTRATIVO Y DE SERVICIOS

#### AUXILIARES ADMINISTRATIVO

Monterrubio García, Jesús

#### TÉCNICOS DE LABORATORIO

García Sánchez, María José

### I.3 BECARIOS DE INVESTIGACIÓN

#### BECARIOS LICENCIADOS PREDOCTORALES

Unai Daniel Sancho Rey, Licenciado en Química, Vic. Investigación - FPI  
Antonio Di Marino, Licenciado en Química, Proyecto M<sup>o</sup> Ciencia y Tecnología.  
Gema Marcelo Alejandre, Licenciada en Química, MEC-For. Profesorado.

## BECAS DE INICIACIÓN A LA INVESTIGACIÓN

Nuria Robledo Álvaro, Licenciada en Química, Vic. Investigación - Iniciación a la Investigación.

Antonio Di Marino, Licenciado en Química, Vic. Investigación - Finalización Tesis Doctoral.

## II. LÍNEAS DE INVESTIGACIÓN

### - ÁREA: QUÍMICA FÍSICA

Modelo de Unión del PLP a enzimas. Descripción: los estudios de la formación de bases de Schiff de PLP con aminas primarias, como modelos de unión del PLP a enzimas, han sido exhaustivos. En la búsqueda de un sistema que simule mejor el proceso enzimático a nivel molecular, se ha propuesto que la molécula portadora del grupo amino fuera un homopolipéptido o un copolipéptido que contenga L-Lisina. Código UNESCO: 2210.03. Profesor: Gerardo Echevarría Gorostidi.

Estudio de reacciones catalizadas por 5' fosfato de piridoxal en condiciones no enzimáticas. Descripción: las bases de Schiff de PLP y polipéptidos que contienen L-lisina, son modelos sencillos de enzimas que pueden utilizarse para simular procesos enzimáticos. En una primera fase se está estudiando el proceso racemización. Código UNESCO: 2210.01. Profesor: Gerardo Echevarría Gorostidi.

Comportamiento físico y reológico de tensioactivos. Descripción: sistemas con tensioactivos se agregan formando estructuras micro y nanométricas (micelas, vesicular, cristales líquidos). La caracterización fisicoquímica de estos sistemas en equilibrio (tipo de fase, y parámetros estructurales) y cuando fluyen (efecto de las fuerzas de la cizalla) es el objetivo de este grupo. Para el estudio se aplican las técnicas de microscopía óptica con luz polarizada, conductividad, tensión superficial, RMN, SAXS, espectrofluorimetría y reología. Código UNESCO: 2210.04. Profesor: Mercedes Valiente Martínez.

Polifosfacenos. Descripción: los polifosfacenos son polímeros que presentan una cadena formada por átomos de fósforo y nitrógeno alternados y grupos laterales orgánicos unidos a los átomos de fósforo. La influencia de los distintos sustituyentes laterales sobre las propiedades conformacionales de estos polímeros se estudia de forma tanto experimental como teórica. Código UNESCO: 2304.07. Profesora: Pilar Tarazona Lafarga.

Propiedades conformacionales. Descripción: se trata de explicar y sistematizar el comportamiento macroscópico de polímeros buscando una relación entre sus propiedades microscópicas y las características macroscópicas. La forma de trabajo consiste en realizar medidas experimentales y cálculos teóricos, mediante el uso de modelos estadísticos adecuados de propiedades sensibles a la microestructura del polímero. Código UNESCO: 2304.08. Profesor: Enrique Saiz García.

Ciclodextrinas y sus complejos de inclusión con moléculas pequeñas y polímeros. Descripción: se estudian los procesos de inclusión de diferentes huéspedes conciclodextrinas. Se obtienen constante de formación, estequiometrías de los complejos y parámetros termodinámicos asociados a los procesos. Desde el punto de vista teórico se simulan esos procesos de complejación utilizando técnicas de mecánica y dinámica molecular. Código UNESCO: 2210.16. Profesor: Francisco Mendicuti Madrid.

Formación de Profesores de Ciencias. Código UNESCO: 5803.02. Profesor: José M<sup>a</sup> Sánchez Jiménez.

Didáctica de Ciencias. Resolución de Problemas de Química. Código UNESCO: 5801.99. Profesor: José M<sup>a</sup> Sánchez Jiménez.

Estudio de la estructura, estabilidad termodinámica y reactividad de compuestos de interés químico, biológico y farmacéutico. Descripción: estudio de la estructura y estabilidad de moléculas, cationes, aniones y radicales neutros considerados estables tanto en fase gas como líquida. Se contempla también el estudio de sus propiedades térmicas y fotoquímicas. Las investigaciones se llevan a cabo con métodos teóricos de alto nivel. Código UNESCO: 2210.23. Profesor: Obis Dionisio Castaño González.

Caracterización electroquímica de antineoplásicos y de su acción biológica. Biosensores. Lipofilia. Descripción: los métodos electroquímicos ofrecen mucha información sobre los agentes anticancerígenos y su acción biológica. En esta línea de investigación se estudian, usando diversas técnicas voltamétricas, diferentes anticancerígenos, más concretamente pirrolobenzodiazepinas. Código UNESCO: 2210.05. Profesora: Dolores Marín Noarbe.

Propiedades estructurales, espectroscópicas y proceso fotoquímicos y de transferencia de energía en compuesto de interés en química orgánica y bioorgánica. Descripción: estudios de reactividad y procesos fotoquímicos en anulenos y polienos. También se lleva a cabo el estudio de los procesos de transferencia de energía triplete-triplete en compuestos de interés en Química Orgánica y Bioorgánica y Medicina. Código UNESCO: 2210.20. Profesor: Obis Dionisio Castaño González.

Estudio fotofísico de copolímeros que contienen grupos carbazol. Descripción: este grupo de polímeros tienen propiedades fotoconductoras. Se estudian dos propiedades, la formación de excímeros y

transferencia de energía electrónica por fluorescencia y por Dinámica Molecular. Estas dos propiedades afectan directamente a la fotoconductividad. Cualquier cambio en los parámetros que afecten a la cantidad de excímeros, como por ejemplo la concentración local de cromóforos, también afectará a la transferencia de energía y, por tanto, a sus propiedades fotoconductoras. Código UNESCO: 2304,08. Profesor: Francisco Mendicuti Madrid.

### III. PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN

#### III.1. PROYECTOS I+D

MERCEDES VALIENTE MARTÍNEZ "Estructura en equilibrio y bajo flujo de cristales líquidos laminares y vesículas de sistemas mixtos de tensioactivos y tensioactivo-polímero". Dirección General de Investigación, MAT2004-04793-C02-02, 20.700,00 €, (13 dic 04 - 12 dic 05).

FRANCISCO MENDICUTI MADRID "Estudio termodinámico y estructural de complejos de inclusión de compuestos modelo y polímeros con ciclodextrinas (polirrotaxanos)". CAM, GR/MAT/0810/2004, 39.675,00 €, (01 ene 05 - 31 dic 05).

### IX. PUBLICACIONES

#### IX.1 ARTÍCULOS DE INVESTIGACIÓN EN REVISTAS ESPECIALIZADAS

L.M. FRUTOS, U. SANCHO, O. CASTAÑO "Intramolecular Triplet-Triplet Energy Transfer in Oxa- and Azadi- $\pi$ -methane Photosensitized Systems". *The Journal of Physical Chemistry A*, 109: 2993-2995, (2005).

M.V. ROUX, J.Z. DÁVALOS, P. JIMÉNEZ, R. NOTARIO, O. CASTAÑO, J.S. CHICKOS, W. HANSHAW, H. ZHAO, N. RATH, J.F. LIEBMAN, B.S. FARIVAR, A. BASHIR-HASHEMI "Cubane, Cuneane, and Their Carboxylates: A Calorimetric, Crystallographic, Computational, and Conceptual Coinvestigation". *J. Org. Chem.*, 70: 5461-5470, (2005).

L.M. FRUTOS, O. CASTAÑO "A new algorithm for predicting triplet-triplet energy-transfer activated complex coordinate in terms of accurate potential-energy surfaces". *The Journal of Chemical Physics*, 123,: 1041081-11, (2005).

D. SANTAMARÍA, J. CANO, P. ROYO, M.E.G. MOSQUERA, T. CUENCA, L.M. FRUTOS, O. CASTAÑO "Carbon Dioxide Activation Assisted by a Bis(chlorodimethylsilyl)cyclopentadienyl Titanium Compound". *Angew. Chem. Int.*, 44: 5828-5830, (2005).

J. SÁNCHEZ-NIEVES, L.M. FRUTOS, P. ROYO, O. CASTAÑO, E. HERDTWECK "Trapping Unstable Terminal Ta-O Multiple Bonds of Monocyclopentadienyl Tantalum Complexes with a Lewis Acid". *Organometallics*, 24: 2004-2007, (2005).

M.M. LÓPEZ-GONZÁLEZ, V. COMPAÑ, E. SAIZ, E. RIANDE, J. GUZMÁN "Effect of the upstream pressure on gas transport in poly(ether-imide) films". *Journal of Membrane Science*, 253: 175-181, (2005).

G. MARCELO, M.P. TARAZONA, E. SAIZ "Solution properties of poly(diallyldimethylammonium chloride) (PDDA)". *Polymer*, 46: 2584-2594, (2005).

M.M. LÓPEZ-GONZÁLEZ, E. SAIZ, E. RIANDE "Experimental and simulation studies of gas sorption processes in pycarbonate films". *Polymer*, 46: 4322-4329, (2005).

G. MARCELO, E. SAIZ, M.P. TARAZONA "Unperturbed dimensions of Carrageenans in different salt solutions". *Biophysical Chemistry*, 113: 201-208, (2005).

M.A. SANZ, N. GRANIZO, M. GRADZIELSKI, M.M. RODRIGO, M. VALIENTE "Mixed micellar systems of octyl  $\beta$ ,D-glucopyranoside with a nonionic surfactant and a water-soluble polymer". *Colloid Polym Sci*, 283: 646-652, (2005).

G.R. ECHEVARRÍA, J.G. SANTOS, A. BASAGOITIA, F. GARCÍA BLANCO "Kinetic and thermodynamic study of the reaction of pyridoxal 5'-phosphate with L-tryptophan". *J. Phys. Org. Chem.*, 18: 546-551, (2005).

P. SEVILLA, C. CIVERA, F. GARCÍA-BLANCO, C. DÍAZ, J. CATALÁN, G. ECHEVARRÍA "Properties of 2,2,2-Trifluoroethanol/Water Mixtures: Acidity, Basicity, and Dipolarity". *Helvetica Chimica Acta*, 88: 312-324, (2005).

G. MONTALVO, A. KHAN "Rheological properties of a surfactant-induced gel for the lysozyme-sodium dodecyl sulfate-water system". *Colloid Polym Sci*, 283: 402-412, (2005).

S. ARÉVALO, E. DE JESÚS, F.J. DE LA MATA, J. C. FLORES, R. GÓMEZ, M.M. RODRIGO, S. IGO "Ethylene polymerization behavior of monometallic complexes and metallodendrimers based on cyclopentadienyl-aryloxy titanium units". *Journal of Organometallic Chemistry*, 690: 4620-4627, (2005).

L. SERNA, A. DI MARINO, F. MENDICUTI "Inclusion complexes of a bichromophoric diester containing anthracene and naphthalene groups with  $\alpha$ - and  $\beta$ -cyclodextrins: thermodynamics and molecular mechanics".

Spectrochimica Acta Part A, 61: 1945-1954, (2005).

I. PASTOR, A. DI MARINO, F. MENDICUTI "Complexes of dihexyl 2,6-naphthalenedicarboxylate with  $\alpha$ - and  $\beta$ -cyclodextrins: Fluorescence and molecular modelling". Journal of Photochemistry and Photobiology A: Chemistry, 173: 238-247, (2005).

J.M. SÁNCHEZ "Calidad y equidad en educación en ciencias. Algunos indicadores". Revista de Educación en Biología, 8: 30-38, (2005).

## **X. COMUNICACIONES A CONGRESOS**

### **X.1 INTERNACIONALES**

G. MARCELO, M.P. TARAZONA, E. SAIZ "Solution properties of carrageenans determined by sec-mals". Second International Symposium on the Separation and Characterization of Natural and Synthetic Macromolecules, NB 7, (2-feb-05), Holanda, (Comunicación).

M.T.R. LAGUNA, D. MARTÍNEZ-SAIZ, M.P. TARAZONA, E. SAIZ "Unperturbed dimensions of polysaccharides in aqueous solution by sec/mals". IV Scientific Meeting of the Spanish Society of romatography and Related Techniques USP, PO-074, (5-oct-04), España, (Comunicación).

D. MARÍN, L. SOLER "Investigation of the interaction of DNA and pyrrolo[1,4]benzodiazepines by cyclic voltammetry". 11<sup>th</sup> Meeting on Recent Developments in Pharmaceutical Analysis, B-P8, (25-sep-05), Italia, (Comunicación).

D. MARÍN, E. DE LA RED "Electrochemical approach of anthramycin methyl ether-DNA interactions". 11<sup>th</sup> Meeting on Recent Developments in Pharmaceutical Analysis, B-P7, (25-sep-05), Italia, (Comunicación).

J.G. SANTOS, E.A. CASTRO, G.R. ECHEVARRÍA, AL OPAZO, P. ROBERT "Polyallylamine and poly(allylamine N-benzylated). Kinetic Studies". European Polymer Congress, P9.2-30, (27-jun-05), Rusia, (Comunicación).

E.A. CASTRO, G. ECHEVARRÍA, A. OPAZO, P. ROBERT, J.G. SANTOS "Aminólisis de compuestos carbonílicos con poliaminas y poliaminoácidos". II Coloquio de Macromoléculas, CI-5, (3-nov-04), Chile, (Comunicación).

G. MARCELO, F. MENDICUTI, E. SAIZ, G.A. CARRIEDO, F.J.G. ALONSO, J.L.G. ÁLVAREZ "Intramolecular energy transfer in polyphosphazenes containing phenoxy and binaphthoxy groups". 9<sup>th</sup> International Conference on Methods and Applications of Fluorescence, P121, (4-sep-05), Portugal, (Comunicación).

C. ALVARIZA, A. DI MARINO, F. MENDICUTI "Inclusion complexes of dimethyl 2,3-naphthalenedicarboxylate with cyclodextrins: fluorescence and molecular modelling". 9<sup>th</sup> International Conference on Methods and Applications of Fluorescence, P2, (4-sep-05), Portugal, (Comunicación).

### **X.2 NACIONALES**

O. CASTAÑO, L.M. FRUTOS, U. SANCHO "Intersecciones cónicas en la fotoquímica de compuestos orgánicos". VII Congreso de Fotoquímica, 32, (22-jun-05), Logroño, (Comunicación).

L.M. FRUTOS, A.U. ACUÑA, O. CASTAÑO "Factores energéticos y estructurales en la transferencia de energía triplete-triplete". VII Congreso de Fotoquímica, 35, (24-jun-05), Logroño, (Comunicación).

U. SANCHO, E. TYMINSKA, L.M. FRUTOS, O. CASTAÑO "Transferencia de energía triplete-triplete en dipéptidos". VII Congreso de Fotoquímica, 123, (24-jun-05), Logroño, (Comunicación).

R. ALONSO, M.T.R. LAGUNA, M.P. TARAZONA "Estudio comparativo de la caracterización por SEC-V y SEC-MALS de homopolímeros y copolímeros de estireno y metilmetacrilato". IX Reunión GEP, C-2-45, (11-sep-05), Jaca, (Comunicación).

M.A. SANZ, M.M. RODRIGO "Difusión de luz del polietilenglicol en disoluciones acuosas". IX Reunión GEP, C-2-47, (11-sep-05), Jaca, (Comunicación).

N. ROBLEDO, G. MONTALVO, M. VALIENTE "Efecto del polímero PEG (10000, 20000) en la topología y reología de la fase laminar diluida del dodeciltetraetilenglicol éter". VI Reunión del Grupo Especializado de Coloides e Interfases, S6P02, (13-jul-05), Salamanca, (Ponencia).

N. GATICA, F. MENDICUTI "Migración de energía en copolímeros de N-vinilcarbazol/estireno". VII Congreso de Fotoquímica, 85, (22-jun-05), Logroño, (Comunicación).

G. MARCELO, F. MENDICUTI "Complejos de inclusión de (R)- y (S)-1,1'-binaftol con  $\alpha$ - y  $\beta$ -cyclodextrinas". VII Congreso de Fotoquímica, 98, (22-jun-05), Logroño, (Comunicación).

I. PASTOR, A. DI MARINO, F. MENDICUTI "Complejos de inclusión de diésteres del ácido 2,6-naftalendicarboxílico con ciclodextrinas". VII Congreso de Fotoquímica, 104, (22-jun-05), Logroño, (Comunicación).

#### **XIV. TESIS DOCTORALES**

RAÚL PALMEIRO URIACH "La teoría de las bifurcaciones de las reacciones químicas y su aplicación a la isomerización de valencia en el ciclooctatetraeno". Director: Obis D. Castaño González, Sobresaliente cum laude, (26-nov-04), Universidad de Alcalá. MARÍA PIEDAD MARTÍN PÉREZ "Bases de Schiff de GABA y GABACULINA. Estudio Químico-Físico". Director: Gerardo R. Echevarría Gorostidi, Sobresaliente cum laude, (18-feb-05), Universidad de Alcalá.

#### **XVII. ESTANCIAS DE INVESTIGACIÓN EN OTROS CENTROS**

G. MONTALVO "Elaboración diagrama de fases lecitina/aceite ricino/agua". Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Central de Ecuador, Quito, Ecuador, (06 oct 05 - 05 nov 05).