

MEMORIA DE INVESTIGACIÓN 2005 - 2006

CURSO ACADÉMICO: 2005 - 2006

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^a

PROFESORES TITULARES DE UNIVERSIDAD

Castaño González, Obis Dionisio

Echevarría Gorostidi, Gerardo

Marín Noarbe, Dolores

Mendicuti Madrid, Francisco

Rodrigo López, M^a Melia

Teijeiro Ferreira, Carmen

Valiente Martínez, Mercedes

PROFESORES TITULARES DE ESCUELA UNIVERSITARIA

Vivas Arce, Eloisa

PROFESORES CONTRATADOS DOCTORES

Montalvo García, Gemma

PROFESORES ASOCIADOS

Gallego Castro, Javier Vicente

Pozo Guerrero, M^a Pilar del

Rodríguez Laguna, M^a 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, C. MADRID.

Gema Marcelo Alejandre, Licenciada en Química, MEC-FPU.

BECAS DE INICIACIÓN A LA INVESTIGACIÓN

Vanessa López Pedroviejo, Licenciada en Química, PROYECTO CAM-UAH.

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 de 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, vesículas, 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. Profesora: 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 con ciclodextrinas. 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^a Sánchez Jiménez.

Didáctica de Ciencias. Resolución de Problemas de Química. Código UNESCO: 5801.99. Profesor: José M^a 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 excimeros y transferencia de energía electrónica por fluorescencia y por Dinámica Molecular. Estas dos propiedades afectan directamente a la fotoconductividad. Cualquiera cambio en los parámetros que afecten a la cantidad de excimeros, 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

FRANCISCO MENDICUTI MADRID "Caracterización de polímeros de interés estructural por fluorescencia, difusión de luz, cromatografía, mecánica y dinámica molecular". Dirección General de Investigación, CTQ2005-04710, 94.010,00 €, (31 dic 05 - 30 dic 08).

FRANCISCO MENDICUTI MADRID "Materiales nanoestructurados de base poliérica , fenómenos de interfase en relación con sus propiedades y aplicaciones avanzadas". CAM, S-0505/MAT/0227, 49.500,00 €, (01 ene 06 - 01 dic 09).

FRANCISCO MENDICUTI MADRID "Caracterización de polímeros fotoconductores y polielectrólitos mediante técnicas fluorescencia, cromatografía y modelización molecular". CAM-UAH, CAM-UAH2005/043, 0,00 €, (01 ene 06 - 31 dic 06).

OBIS DIONISIO CASTAÑO GONZÁLEZ "Estudio teórico de procesos fotoinducidos en proteínas: procesos fotoquímicos de isomeria cis-trans y de transferencia electrónica y de energía triplete-triplete". CAM-UAH, CAM-UAH2005/037, 14.500,00 €, (01 ene 06 - 31 dic 06).

MERCEDES VALIENTE MARTÍNEZ "Estudio del comportamiento físico de mezclas polímero-tensioactivo y su aplicación como sistemas de extracción-preconcentración de analitos". UA, UAH GC2006-008, 12.000,00 €, (22 feb 06 - 21 feb 07).

IX. PUBLICACIONES

IX.1 ARTÍCULOS DE INVESTIGACIÓN EN REVISTAS ESPECIALIZADAS

S.M. BAKALOVA, L.M. FRUTOS, J. KANETI, O. CASTAÑO "Correlated MO Study of the Low-Barrier Intramolecular Motions in Donor-Acceptor Ethenes". J. Physical Chemistry A, 109: 10388-10395, (2005).

N. GRANIZO, M. ÁLVAREZ, M. VALIENTE "The effect of octyl glucoside on rheological behavior of diluted and concentrated lamellar phases". Journal of Colloid and Interface Science, 298: 363-368, (2006).

D. MARÍN, L. SOLER, D.E. THURSTON "Voltammetric studies of the interaction of pyrrolo[2,1-c][1,4]benzodiazepine (PBD) monomers and dimers with DNA". Journal of Electroanalytical Chemistry, 593: 241-246, (2006).

E. A. CASTRO, G. R. ECHEVARRÍA, A. OPAZO, P. S. ROBERT, J. G. SANTOS "Kinetics and mechanism of the reactions of polyallylamine with aryl acetates and aryl methyl carbonates". Journal of Physical Organic Chemistry, 19: 129-135, (2006).

J. DÍEZ, M. P. GAMASA, E. LASTRA, A. GARCÍA-FERNÁNDEZ, M. P. TARAZONA "Transfer Hydrogenation of Ketones Catalysed by New Half-Sandwich Ruthenium(II) Complexes Bearing the Sulfonated Phosphane (meta-Sulfonatophenyl)diphenylphosphane Potassium Salt (TPPMS)". *Eur. J. Inorg. Chem.*, 2855-2864, (2006).

G. MARCELO, E. SAIZ, F. MENDICUTI, G. A. CARRIEDO, F. J. GARCÍA ALONSO, J. L. GARCÍA ÁLVAREZ "Analysis of the Secondary Structure of Random Copolymers by a Combination of Fluorescence and Molecular Dynamics Methods. Application to Polyphosphazenes Containing Phenoxy and Binaphthoxy Groups". *Macromolecules*, 39: 877-885, (2005).

N. GATICA, G. MARCELO, F. MENDICUTI "Fluorescence and molecular dynamics to study the intramolecular energy transfer in N-vinyl carbazole/styrene copolymers of different molar compositions". *Polymer*, 47: 7397-7405, (2006), U.S.A..

A. DI MARINO, L. RUBIO, F. MENDICUTI "Fluorescence and Molecular Mechanics of 1-Methyl Naphthalenecarboxylate/Cyclodextrin Complexes in Aqueous Medium". *Journal of Inclusion Phenomena and Macrocyclic Chemistry*, (2006), U.S.A..

C. ALVARIZA, R. USERO, F. MENDICUTI "Binding of dimethyl 2,3-naphthalenedicarboxylate with α -, β - and γ -cyclodextrins in aqueous solution". *Spectrochimica Acta Part A*, (2006), USA.

M. GONZÁLEZ-MAUPOEY, R. CUENCA, L. M. FRUTOS, O. CASTAÑO, E. HERDTWECK, B. RIEGER "Alkylmono(cyclopentadienyl)titanium Complexes Containing the 2,2'-Methylenebis(6-*tert*-butyl-4-methylphenoxido) Ligand - Studies on the Nature of the Catalytic Species Present in α -Olefin Polymerisation Processes". *Eur. J. Inorg. Chem.*, (2006).

X. COMUNICACIONES A CONGRESOS

X.1 INTERNACIONALES

O. CASTAÑO, L.M. FRUTOS, U. ACUÑA "First Principle Determination of Energetic and Structural Factors in the Triplet-Triplet Energy Transfer". Third Humboldt Conference on Computational Chemistry, 23, (24-jun-06), Bulgaria, (Comunicación).

S. BAKALOVA, J. KANETI, A.U. ACUÑA, O. CASTAÑO "In silico Screening of a new class of boron pyrromethene chromophores". Third Humboldt Conference on Computational Chemistry, 36, (24-jun-06), Bulgaria, (Comunicación).

O. CASTAÑO, L.M. FRUTOS, A.U. ACUÑA "Energetic and Structural Factors Modulating Triplet-Triplet Energy Transfer Processes". XI-th European Workshop on Quantum Systems in Chemistry and Physics (QSCP-XI), MSS-4, (20-ago-06), Rusia, (Comunicación).

L. M. FRUTOS, R. PALMEIRO, U. SANCHO, E. VÉLEZ, O. CASTAÑO "Intramolecular electron and energy transfer processes in small organic bichromophoric systems_ General Aspects of the Potential Energy Surfaces". XI-th European Workshop on Quantum Systems in Chemistry and Physics (QSCP-XI), P-46, (20-ago-06), Rusia, (Comunicación).

R. PALMEIRO, O. CASTAÑO "A new definition of valley ridge inflection point on an Adiabatic potential energy surface". XI-th European Workshop on Quantum Systems in Chemistry and Physics (QSCP-XI), P-47, (20-ago-06), Rusia, (Comunicación).

U. SANCHO, L.M. FRUTOS, O. CASTAÑO, J.L. ANDRÉS "Photoinduced Selectivity in di- π -methane Rearrangements on Barrelenes". XI-th European Workshop on Quantum Systems in Chemistry and Physics (QSCP-XI), P-48, (20-ago-06), Rusia, (Comunicación).

O. CASTAÑO, L. M. FRUTOS, U. SANCHO "Las interacciones cónicas y su papel crucial en la fotoquímica orgánica". Le XXXIIème Congrès Des Chimistes Théoriciens d'Expression Latine, CT2, (1-sep-06), Tunes, (Comunicación).

M. DÍAZ, C. GODOY, Y. GONZÁLEZ LEMUS, G. MONTALVO, M. VALIENTE "Rheological studies of liquid crystalline phases in highly concentrated soybean lecithin systems". 20th Conference of the European Colloid and Interface Society and 18th European Chemistry at Interfaces Conference, P8.50, (17-sep-06), Hungría, (Comunicación).

S. VERA, G. TABOADA, M. SÁNCHEZ, M.P. SAN ANDRÉS, M. VALIENTE "Retinol fluorescence enhancement by surfactant mediated extraction methodologies". 20th Conference of the European Colloid and Interface Society and 18th European Chemistry at Interfaces Conference, P8.51, (17-sep-06), Hungría, (Comunicación).

N. GATICA, G. MARCELO, F. MENDICUTI "Transferencia de energía intramolecular en copolímeros que contienen grupos carbazol". XXVI Jornadas Chilenas de Química, 139, (10-ene-06), Chile, (Comunicación).

O. CASTAÑO, L. M. FRUTOS, A. ULISES ACUÑA "Determinación *ab initio* de los factores energéticos y estructurales en la transferencia de energía triplete-triplete". Quitel 2005, CI-46, (5-oct-05), Venezuela, (Comunicación).

L. M. FRUTOS, O. CASTAÑO "Un nuevo algoritmo para el estudio de los procesos de transferencia de energía triplete-triplete en términos de SEPs precisas". Quitel 2005, PI-18, (5-oct-05), Venezuela, (Comunicación).

U. SANCHO, L.M. FRUTOS, O. CASTAÑO, M. MERCHÁN, L. SERRANO-ANDRÉS "Transferencia de Energía Triplete-Triplete en el plegamiento de Proteínas". Quitel 2005, PII-65, (5-oct-05), Venezuela, (Comunicación).

XIV. TESIS DOCTORALES

ALEJANDRO SANZ PARRAS "Interrelación entre noestructura y dinámica en materia condensada blanda: polímeros frente a compuestos de bajo peso molecular". Directores: Tiberio Ezquerra Sanz y Aurora Nogales Ruiz, Sobresaliente cum laude, (14-dic-05), Universidad de Alcalá.

MARTA ÁLVAREZ CHAMORRO "Desarrollo de nuevos láseres de estado sólido basados en colorantes orgánicos incorporados en matrices sólidas". Director: Ángel Costela González, Sobresaliente cum laude, (20-ene-06), Universidad de Alcalá.