

MEMORIA DE INVESTIGACIÓN 2007

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**

Esteso Díaz, Miguel Ángel (CU)
Saiz García, Enrique (CU)
Tarazona Lafarga, Pilar (CU)
Sánchez Jiménez, José M^a (CEU)
Castaño González, Obis Dionisio (TU)
Echevarría Gorostidi, Gerardo (TU)
Marín Noarbe, Dolores (TU)
Mendicuti Madrid, Francisco (TU)
Rodrigo López, M^a Melia (TU)
Teijeiro Ferreira, Carmen (TU)
Valiente Martínez, Mercedes (TU)
Vivas Arce, Eloisa (TEU)
Montalvo García, Gemma (PCD)
Frutos Gaité, Luis Manuel (RyC)
Palmeiro Uriach, Raúl (PAD)
Diez Fernández, Raúl (PA)
Gallego Castro, Javier Vicente (PA)
Panadero Esteban, M^a Isabel (PA)
Pozo Guerrero, M^a Pilar del (PA)
Rodríguez Laguna, M^a Teresa (PA)

I.2 PERSONAL ADMINISTRATIVO Y DE SERVICIOS

Monterrubio García, Jesús (AUX ADMTVO)
García Sánchez, María José (TEC. LAB.)

I.3 BECARIOS DE INVESTIGACIÓN

Alves Ventura Santos, Cecilia Isabel (Becas de Iniciación a la Investigación)
Fernández Peña, Natalí (Beca MAEC-AECID. Programa II-A)
González Álvarez, M^a José (Beca de Colaboración MEC)
Marcelo Alejandre, Gema (Beca MEC-FPU)
Sancho Rey, Unai (FPI - Comunidad de Madrid)

II. LÍNEAS DE INVESTIGACIÓN

- ÁREA: QUÍMICA FÍSICA

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.

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.

Comportamiento fásico 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.

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.

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.

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.

Formación de Profesores de Ciencias. Código UNESCO: 5803.02. Profesor: José M^a Sánchez Jiménez.

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.

Caracterización de polímeros: polifosfacenos y polielectrólitos. Descripción: Los polifosfacenos presentan una cadena formada por átomos de fósforo y nitrógeno alternados y grupos laterales orgánicos unidos a los átomos de fósforo. Los polielectrólitos contienen grupos ionizables a lo largo de la cadena. Se utiliza la cromatografía de exclusión, combinada con la difusión de luz y otras técnicas, así como métodos teóricos, para el estudio de propiedades conformacionales de estos polímeros. 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.

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.

Electroquímica. Descripción: Determinación de valores correspondientes a propiedades termodinámicas y de transporte, para sistemas iónicos en disolución, mediante el empleo de técnicas electroquímicas. Código UNESCO: 2307.05. Profesor: Miguel Angel Esteso Díaz

III. PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN

OBIS D. CASTAÑO GONZÁLEZ “Transferencia de energía y transferencia electrónica: aspectos teóricos y aplicación a compuestos orgánicos de interés químico y biológico”, Dirección General de Investigación, CTQ2006-07643, 60.500,00 € (01-10-2006 / 30-09-2009).

LUIS M. FRUTOS GAITE “Estudio químico-cuántico de procesos fotoquímicos y de transferencia en sistemas químicos y biológicos”, Ministerio de Educación y Ciencia, RYC2007-00095, 15.000 € (13-12-2007/12-23-2009).

MERCEDES VALIENTE MARTÍNEZ “Caracterización de agregados nanométricos de lecitina de soja en medios biocompatibles para estabilización, detección y cuantificación de vitaminas liposolubles”, Universidad de Alcalá (UAH), CCG06-UAH/MAT-0423, 11.623 € (01-01-2007 / 31-12-2007)

MERCEDES VALIENTE MARTÍNEZ “Sistemas nanoestructurados de tensioactivos: nuevas estrategias para el análisis de Vitamina A”, Dirección General de Investigación, CTQ2007-65421, 7.260,00 € (01-10-2007 / 30-09-2008)

IX. PUBLICACIONES

IX.1 ARTÍCULOS DE INVESTIGACIÓN EN REVISTAS ESPECIALIZADAS

L.M. FRUTOS, U. SANCHO, M. GARAVELLI, M. OLIVUCCI, O. CASTAÑO “The role of Intersection Space in the Photochemistry of Tricyclo[3.3.0.0^{2,6}]octa-3,7-diene”, Journal of Physical Chemistry A, 2830-2838, (2007)

M. GONZÁLEZ-MAUPOEY, T. CUENCA, L. M. FRUTOS, O. CASTAÑO, E. HERDTWECK, B. RIEGER “Monocyclopentadienyl alkyl complexes of titanium containing the 2,2'-methylene-bis(4-methyl-6-tert-butyl-phenoxy) ligand. Synthesis, characterization and polymerization catalyst behavior. Studies on the nature of the catalytic species for the π -olefin polymerization processes”. European Journal of Inorganic Chemistry, 147-161. (2007)

L. M. FRUTOS, T. ANDRUNIOW, N. FERRÉ, F. SANTORO, M. OLIVUCCI “Tracking the Excited State Time Evolution of the Visual Pigment with Multiconfigurational Quantum Chemistry”. Proceedings of the National Academy of Sciences (USA), 7764-7769. (2007)

L. M. FRUTOS, A. MARKMANN, A. L. SOBOLEWSKI, W. DOMCKE “Photoinduced Electron and Proton Transfer in the Pyridine-Pyrrole Dimer: a Model of Hydrogen_bond Photochemistry in DNA”. Journal of Physical Chemistry B, 6110-6112. (2007)

F. MONTILLA, L. M. FRUTOS, C. REYES MATEO, R.MALLAVIA “Exciton dynamics in conjugated polymers studied by in situ electrochemical fluorescence”. Journal of Physical Chemistry C, 18405-18410. (2007)

D. GARCÍA-CUADRADO, A. M. CUADRO, J. ÁLVAREZ-BUILLA, U. SANCHO, O. CASTAÑO, J. J. VAQUERO “The first Synthesis of Biquinolizinium Salts: A novel example of a chiral Azonia dication”. Organic Letters, 5955-5958. (2006)

R. PALMEIRO, O. CASTAÑO “New Valley Ridge Inflection Point Associated to the Bifurcation of a Valley on Potential Energy Surfaces”. International Journal of Quantum Chemistry, 2687-2696. (2007).

G. MARCELO, F. MENDICUTI, E. SAIZ, M.P. TARAZONA "Combination of SEC-MALS and Fluorescence with Molecular Dynamics Simulations for the Analysis of Ionomer Dimensions in Solution. Application to Poly(2-acrylamido-2-methyl-1-propanesulfonic acid-co-styrene)". *Macromolecules*, 1311-1320. (2007)

M.P. TARAZONA, E. SAIZ "A few examples illustrating the molecular weight distribution of polymers". *Journal Chemical Education*, 1-5. (2007)

G. MARCELO, E. SAIZ, M.P. TARAZONA "Determination of molecular parameters of hydroxyethyl and hydroxypropyl celluloses by chromatography with dual detection". *Journal of Chromatography A*, 45-51. (2007)

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*, 103-114. (2007)

A. DI MARINO, F. MENDICUTI "Rationalizing some experimental facts on the Complexation of 2-Methyl Naphthalenecarboxylate and hydroxypropylyed Cyclodextrins by Molecular Mechanics and Molecular Dynamics". *Journal of Inclusion Phenomena and Macrocyclic Chemistry*, 295-305. (2007)

C. ALVARIZA, F. MENDICUTI "Binding of Dimethyl 2,3-Naphthalenedicarboxylate with α - and β -cyclodextrins in aqueous solution". *Spectrochimica Acta: Part A*, 420-429. (2007)

F. MENDICUTI "Application of fluorescence techniques and modelling to the study of the complexation of chromophore-containing guests with cyclodextrins". *Research Trends*, 61-77. (2006)

P. BALBUENA, D. LESUR, M. J. GONZÁLEZ-ÁLVAREZ, F. MENDICUTI, C. ORTIZ MELLET, M. GARCÍA FERNÁNDEZ "O ne-pot regioselective synthesis of 2¹,3¹-O-(Xylylene)-capped cyclomaltooligosaccharides: tailoring the topology and supramolecular properties of cyclodextrins". *Chemical Communications*, 3270-3272. (2007)

G. MONTALVO, M. VALIENTE, A. KHAN "Shear-Induced Topology Changes in Liquid Crystals of the Soybean Lecithin/DDAB/Water System". *Langmuir*, 10518-10524. (2007)

A.C.F. RIBEIRO, M.A. ESTESO, V.M.M. LOBO, A.J.M. VALENTE, S.M.N. SIMÕES, A.J.F.N. SOBRAL, L. RAMOS, H.D. BURROWS, A.M. AMADO AND A.M. AMORIM DA COSTA "Interactions of Copper (II) Chloride with β -Cyclodextrin in Aqueous Solutions". *J. Carbohydrate Chemistry*, 25: 173-185. (2006)

A.C.F. RIBEIRO, M.A. ESTESO, V.M.M. LOBO, H.D. BURROWS, A.M. AMADO, A.M. AMORIM DA COSTA, A.J.F.N. SOBRAL, E.F.G. AZEVEDO, M.A.F. RIBEIRO "Mean distance of closest approach of ions: Sodium salts in aqueous solutions". *J. Molecular Liquids*, 128: 134-139. (2006)

A.C.F. RIBEIRO, D.G. LEAIST, MA. ESTESO, V.M.M. LOBO, A.J.M. VALENTE, C.I.A.V. SANTOS, A.M.T.D.P.V. CABRAL, F.J.B. VEIGA "Binary Diffusion Coefficients for Aqueous Solutions of β -Cyclodextrin at temperatures from 298.15 K and 312.15 K". *J. Chemical and Engineering Data*, 51: 1368-1371. (2006)

A.C.F. RIBEIRO, M.A. ESTESO, V.M.M. LOBO, A.J.M. VALENTE, S.M.N. SIMÕES, A.J.F.N. SOBRAL, H.D. BURROWS "Interactions of copper (II) chloride with sucrose, glucose and fructose in aqueous solutions". *J. Molecular Structure*, 826: 113-119. (2007)

R.R. RAPOSO, E. CALVIÑO AND M.A. ESTESO "Determination of Hydrogen Solubility Values in Some Human Fluids by Using an Electrochemical Sensor". *Electrochemical Society Transactions*, 3: 127-134. (2007)

A.C.F. RIBEIRO, A.J.M. VALENTE, A.J.F.N. SOBRAL, V.M.M. LOBO, H.D. BURROWS, M.A. ESTESO "Diffusion coefficients of aluminium chloride in aqueous solutions at 298.15 K, 303.15 K and 315.15 K", *Electrochim. Acta*, 52: 6450-6455. (2007)

A.C.F. RIBEIRO, A.J.M. VALENTE, C.I.A.V. SANTOS, P.M.R.A. PRAZERES, V.M.M. LOBO, H.D. BURROWS, M.A. ESTESO, A.M.T.D.P.V. CABRAL, F.J.B. VEIGA "Binary Mutual Diffusion

Coefficients of Aqueous Solutions of α -Cyclodextrin, 2-Hydroxypropyl- α -cyclodextrin, and 2-Hydroxypropyl- β -cyclodextrin at temperatures from (298.15 to 312.15) K". J. Chemical and Engineering Data, vol 52, 586-90. (2007)

E. CASTRO, G. ECHEVARRIA, A. OPAZO, P. ROBERT, J. BLANCO "Reaction of poly-L-lysine with aryl acetates and aryl methyl carbonates. A mechanistic study", Journal of Physical Organic Chemistry. Publicado online. (2007)

M.J. FERNÁNDEZ, B. WILSON, M. PALACIOS, M.M. RODRIGO, K.B. GRANT, A. LORENTE "Copper-Activated DNA Photocleavage by a Pyridine-Linked Bis-Acridine Intercalator". Bioconjugate Chemistry, 121-129. (2007)

J. POZUELO, E. RIANDE, E. SAIZ, V. COMPAÑ "Molecular Dynamics Simulations of proton conduction in sulfonated poly(phenyl sulfone)s". Macromolecules, 8862-8866. (2006) (diciembre)

IX.2 CAPÍTULOS DE LIBROS DE INVESTIGACIÓN

W. E. MUÑOZ-GARZÓN, G. MONTALVO "Rheological Properties of the Liquid Crystalline Phases of the Soybean Lecithin/Ricin Oil/Water System". Colloids and Interfaces-Book of Proceedings RIC12 (2nd Iberic Meeting of Colloids and Interfaces), Sociedade Portuguesa de Química (SPQ), Valente, A.J. M.; Seixas de Melo, J. S., Eds, 487-492. (2007)

X. TESIS DOCTORALES

GEMA MARCELO ALEJANDRE "Estudio de la microestructura de polímeros mediante cromatografía con detección múltiple, fluorescencia y dinámica molecular", Directores: M^a Pilar Tarazona Lafarga, Francisco Mendicuti Madrid y Enrique Saiz García, Sobresaliente Cum Laude, (20-04-07), Universidad de Alcalá.

ELYN CALVIÑO PÉREZ "Determinación de H₂ gas disuelto en orina. Una herramienta útil para el diagnóstico de patologías gastrointestinales", Directores: Miguel Ángel Esteso Díaz y Raquel Rodríguez Raposo. Sobresaliente "Cum Laude", (01-12-06), Universidad de La Laguna.

XI. PREMIOS DE INVESTIGACIÓN

LUIS MANUEL FRUTOS "Quantum Systems in Chemistry and Physics" Promising Scientist Prize of "Centre de Mecanique Ondulatoire Appliquee", 1.000 €

LUIS MANUEL FRUTOS "Bürgen Scholar in recognition of excellent academic achievements", 200 £

XIII. ESTANCIAS DE INVESTIGADORES EXTRANJEROS

JOSE YANTO KANETI "Exploración in Silico de una nueva clase de cromóforos de Pirrometeno de Boro (In Silico Screening of a New Class of Boron Pyrromenthene Chromophores)", Instituto de Química Orgánica de la Academia de Ciencias de Bulgaria, Bulgaria. 01/10/2007 - 1/12/2008

XIV. ESTANCIAS EN OTROS CENTROS

LUIS MANUEL FRUTOS "Wave packet dynamics and semiclassical trajectories in energy and electron transfer processes: Application to biological systems", Universidad Técnica de Munich., 01/05/2006 - 30/11/2007