

MEMORIA DE INVESTIGACIÓN 2008

FACULTAD O ESCUELA: FACULTAD DE FARMACIA

DEPARTAMENTO: QUÍMICA INORGÁNICA

DIRECTOR: D. TOMÁS CUENCA ÁGREDA

ÁREAS DE CONOCIMIENTO:

- QUÍMICA INORGÁNICA

I. PERSONAL

I.1 PERSONAL INVESTIGADOR

- **ÁREA: QUÍMICA INORGÁNICA**

Cuenca Ágrede, Tomás (CU)
Gómez Rubio, Manuel (CU)
Cano Sierra, Jesús (TU)
Flores Serrano, Juan Carlos (TU)
Gómez Ramírez, Rafael (TU)
Gómez Sal, M^a Pilar (TU)
González Mosquera, Marta Elena (TU)
Jesús Alcañiz, Ernesto de (TU)
Jiménez Pindado, Gerardo (TU)
Martín Alonso, Avelino (TU)
Mata de la Mata, Francisco Javier de la (TU)
Mena Montoro, Miguel (TU)
Vázquez de Miguel, Amelio (TU)
Yélamos Sánchez, Carlos (TU)
Royo Gracia, Pascual (PE mérito)
Andrés Herranz, Román (PCD)
Santamaría Angulo, Cristina (PCD)
García Castro, María (AY LOU)
Pérez Redondo, Adrián (AY LOU)
Tabernero Magro, M^a Vanessa (PAD)

I.2 PERSONAL ADMINISTRATIVO Y DE SERVICIOS

Bueno Rodríguez, M^a Jesús (AUX ADMTVO)
Boto García, Gregorio (TEC. LAB.)
Naveda Yaque, Juan Manuel (TEC. LAB.)
Sanz Somolinos, Marcial (TEC. LAB.)

I.3 BECARIOS DE INVESTIGACIÓN

Amo Sánchez, Virginia (PIA con cargo a Contrato art. 83)
Arnáiz Garrido, Eduardo (Apoyo Técnico con cargo a Proyectos)
Camejo Abreu, Claudimar (FPI-MEC)

Cañas Gando, Miriam (Finnova-CAM)
Chabhoun Chabhoun, Ghaita (Becaria AECEI)
García García, Carlos (FPI-UAH)
González del Moral, Octavio (FPU – MEC)
Gordillo Bolonio, Álvaro (FPU – MEC)
Hernán-Gómez Robledo, Alberto (FPU-MEC)
Hernán-Gómez Robledo, Alberto (FPI-UAH)
Hernán-Gómez Robledo, Alberto (Ayudas de Iniciación en al Actividad Investigadora)
Martínez Espada, Noelia (FPU – MEC)
Martínez Olid, Francisco José (Introducción en la Investigación)
Ortiz Alvarez, Alba M^a (Ayudas de Iniciación en al Actividad Investigadora)
Ortiz Alvarez, Alba M^a (FPI-UAH)
Ortiz Alvarez, Alba M^a (FPU-MEC)
Paniagua Paniagua, Cristina (FPI-UAH)
Pedrosa Jiménez, Sergio (PIF con cargo a Proyectos)
Petrisor, Cristina Elena (FPI – UAH)
Rasines Moreno, Beatriz (Apoyo Técnico)
Silbestri, Gustavo Fabián (Profesores e Investigadores extranjeros)
Ventura Sánchez-Hornero, María (FPI-UAH)

I.4 CONTRATADOS DE INVESTIGACIÓN

Andrés Herrnaz, Román (Programa Ramón y Cajal)
Bernechea Navarro, María (Contratos con cargo a Proyectos, Contratos y Convenios)
Cano Sierra, Jesús (Programa Juan de la Cierva)
Cañas Gando, Miriam (Contratos con cargo a Proyectos, Contratos y Convenios)
González del Moral, Octavio (Ayudas PIF, FPU-MEC)
Gordillo Bolonio, Álvaro (Ayudas PIF, FPU-MEC)
Londaitshere Trujillo, Addis Mercedes (PIA-CM)
Maestre Casas, M. Del Carmen (Ayudas PIF, FPU-MEC)
Martínez Martínez, Gema (Contratos con cargo a Proyectos, Contratos y Convenios)
Paniagua Paniagua, Cristina (PIA CM)
Póstigo Galindo, Lorena (Ayudas PIF, FPI-MEC)
Royo Cantabrana, Eva (Programa Ramón y Cajal)
Sebastián Navas, Alfredo (Contratos con cargo a Proyectos, Contratos y Convenios)
Silbestri, Gustavo Fabián (Ayudas Jóvenes Doctores y Tecnólogos Extranjeros)

II. LÍNEAS DE INVESTIGACIÓN

- ÁREA: QUÍMICA INORGÁNICA

Catalizadores organometálicos de polimerización de olefinas. Descripción: Diseño y síntesis de complejos organometálicos de metales de los primeros grupos de transición con actividad catalítica en procesos de polimerización de olefinas. Síntesis de nuevos ligandos, estudio estructural de precursores, identificación de especies activas, mecanismo de polimerización y caracterización estructural del polímero resultante. Determinación de la relación entre catalizador y propiedades del polímero. Nuevos materiales poliolefinicos de propiedades predeterminadas. Código UNESCO: 2303.21. Profesor: Pascual Royo Gracia.

Complejos ciclopentadienilo de metales de los primeros grupos de transición y sus aplicaciones. Descripción: Esta línea de investigación comprende todos los estudios de síntesis y caracterización estructural de compuestos que contienen uno o dos ligandos ciclopentadienilo unidos a metales de los grupos 4, 5 y 6 en distintos estados de oxidación. Asimismo, se incluyen todos los estudios relacionados con las posibles aplicaciones de dichos compuestos en procesos estequiométricos de formación de

enlaces C-C y de activación de enlaces C-H y en distintos procesos catalíticos en fase homogénea. Código UNESCO: 2303.21. Profesor: Pascual Royo Gracia.

Complejos organometálicos y de coordinación de los elementos de los primeros grupos de transición. Síntesis, caracterización estructural y aplicaciones catalíticas. Descripción: Implica la síntesis de moléculas orgánicas como precursores de ligandos novedosos para preparar complejos organometálicos y de coordinación de los elementos de los primeros grupos de transición. La aplicación de las técnicas de caracterización permiten conocer la disposición estructural de los nuevos complejos metálicos. La L.I. se completa con el estudio de las aplicaciones catalíticas de dichos compuestos, principalmente en procesos de polimerización de olefinas. Código UNESCO: 2303.21. Profesor: Tomás Cuenca Ágreda.

Compuestos de coordinación y organometálicos en aplicaciones biomédicas. Descripción: Se propone la síntesis de compuestos organometálicos y de coordinación principalmente de elementos de los grupos de transición para su aplicación posterior en distintas aplicaciones biomédicas, tales como antivirales, antibacterianos o anticancerígeno. Código UNESCO: 2303.07 y 2303.21. Profesor: Javier de la Mata de la Mata/ Rafael Gómez Ramírez.

Dendrimeros para aplicaciones biomédicas. Descripción: Se propone la síntesis y caracterización de dendrimeros basados en un esqueleto tipo carbosilano, aunque no se descarta el uso de matrices dendríticas basadas en DAB, PAMAM, polifeniléter (tipo Fréchet) o híbridos de distinta naturaleza, solubles en agua, que sirvan de vehículos para el transporte de distintos tipos de fármacos principalmente como vectores no virales en terapia génica o como agentes terapéuticos (antivirales, antibacterianos, anticancerígenos o antiprionicos). Código UNESCO: 2303. Profesores: Rafael Gómez Ramírez/Javier de la Mata de la Mata.

Derivados organometálicos de metales de los grupos 13 y 14. Descripción: Esta línea comprende el diseño de nuevas rutas sintéticas para la preparación de compuestos alquilo y alcoxido de metales de los grupos 13 y 14, mono y polimetálicos, así como el estudio de la reactividad de los derivados preparados. Asimismo, una parte importante de los estudios se centra en el análisis estructural detallado por difracción de Rayos X de los derivados obtenidos. Código UNESCO: 2303.21. Profesora: Marta Elena González Mosquera.

Estudios estructurales de compuestos orgánicos y organometálicos. Descripción: Se trata del estudio de la estructura molecular y cristalina de compuestos orgánicos y organometálicos fundamentalmente mediante técnicas de difracción de rayos X, incluyendo estudios de interacciones intermoleculares y tratamiento teórico. Código UNESCO: 2211.05. Profesora: M^a Pilar Gómez Sal.

Nuevos catalizadores basados en moléculas dendríticas. Descripción: El desarrollo de catalizadores homogéneos más activos y específicos, que puedan ser usados en agua y en disolventes benignos para el medio ambiente, es fundamental para satisfacer las exigencias actuales en la producción de polímeros, fármacos, intermedios industriales o materiales para nuevas tecnologías. Los dendrimeros son macromoléculas cuya versatilidad y propiedades específicas, han dado lugar a una nueva generación de materiales nanotecnológicos, entre los que se incluyen catalizadores. Código UNESCO: 2303. Profesor: Ernesto de Jesús Alcañiz.

Óxidos y nitruros metálicos moleculares. Descripción: Los óxidos y nitruros metálicos son materiales de gran importancia tecnológica con muy variadas aplicaciones. Su repercusión en la industria química es fundamental puesto que son componentes esenciales de catalizadores utilizados en la obtención de numerosos productos químicos con gran impacto económico. Por ello, el estudio teórico/práctico de los procesos que tienen lugar en sistemas moleculares análogos cobra especial relevancia y constituye uno de los grandes retos de la Química actual. Código UNESCO: 2303. Profesor: Miguel Mena Montoro.

Síntesis, estudio estructural y reactividad de organocomplejos de Niobio y Tántalo. Descripción: Las aplicaciones de los complejos organometálicos en síntesis y catálisis han determinado que los procesos de formación y activación de enlaces C-C y C-H, respectivamente, tengan una considerable importancia en Química Organometálica. Esta línea de trabajo tiene como objetivos, establecer la utilidad de los organoderivados de Niobio y Tántalo en procesos de síntesis orgánica y diseñar moléculas cuyas propiedades estéricas y electrónicas les confieran una potencial actividad catalítica en procesos de interés industrial. Código UNESCO: 2303.21. Profesor: Manuel Gómez Rubio.

Síntesis y caracterización estructural de redes metalorgánicas. Descripción: Las redes metalorgánicas son un nuevo tipo de materiales híbridos con propiedades novedosas y que están compuestos por nodos metálicos conectados entre sí a través de espaciadores orgánicos. Esta línea implica la síntesis y caracterización estructural de redes formadas por metales de elementos representativos. Respecto a análisis estructural el empleo de difracción de Rayos X constituye una parte esencial del trabajo. Código UNESCO: 2303 y 2211.05. Profesoras: Marta Elena González Mosquera y M^a Pilar Gómez Sal.

III. CONTRATOS DE INVESTIGACIÓN

FCO. JAVIER DE LA MATA DE LA MATA, RAFAEL GÓMEZ RAMÍREZ “Síntesis de dendrímeros de estructura carbosilano para aplicaciones biomédicas” Déndrico S.L, 11.600 € (01-06-2008 / 31-12-2008)

IV. ACCIONES COMPLEMENTARIAS

RAFAEL GÓMEZ RAMÍREZ “Ácidos nucleicos cortos anti-VIH transportados por nanovehículos basados en dendrímeros como aproximación terapéutica novedosa para la infección VIH-1”, NAN2007-31135-E (DGI), 100.000 € (01/05/08 al 01/05/11)

V. PATENTES

V.1 PATENTES CONCEDIDAS:

FCO. JAVIER DE LA MATA DE LA MATA, RAFAEL GÓMEZ RAMÍREZ, JUAN CARLOS FLORES SERRANO, ERMESTO DE JESÚS ALCAÑIZ, PAULA ORTEGA LÓPEZ, M^a ANGELES MUÑOZ FERNÁNDEZ, J. FCO. BERMEJO MARTÍN, M^a JESÚS SERRAMÍA LOBERA, JERÓNIMO FERNÁNDEZ GÓMEZ-CHACÓN, LOUIS CHONCO JIMÉNEZ., P200501810, Universidad de Alcalá.

VI. PUBLICACIONES

VI.1 ARTÍCULOS DE INVESTIGACIÓN EN REVISTAS ESPECIALIZADAS

M.C. MAESTRE, M.E. GÓNZALEZ-MOSQUERA, H. JACOBSEN, G. JIMÉNEZ, T. CUENCA “Imido versus Amido-Silyl-Cyclopentadienyl Niobium Complexes. The Role of Additional Amino Functionalities: A Combined Experimental and Theoretical Study”, *Organometallics*, 27: 839-849 (2008)

C.E. PETRISOR, L.M. FRUTOS, O. CASTAÑO, M.E.G. MOSQUERA, E. ROYO, T. CUENCA “Olefin isomerisation versus hydrozirconation: a case of a stable η^2 -hydrogen-containing Zr-Alkyl derivative”, *Dalton Transactions*, 2670-2673 (2008)

G. MARTÍNEZ, S. PEDROSA, V. TABERNERO, M.E.G. MOSQUERA, T. CUENCA “Controlled Synthesis of Novel Aryloxi Polynuclear Aluminum Species. Study of their Catalytic Properties in Polymerization Processes”, *Organometallics*, 27: 2300-2305 (2008)

O. BUITRAGO, M.E.G. MOSQUERA, G. JIMÉNEZ, T. CUENCA “Organotitanoxane with Unique Structure Among Transition Element Organometallic-Oxide Derivatives”, *Inorg. Chem.*, 3940-3942 (2008)

G. ALESSO, M. SANZ, M.E.G. MOSQUERA, T. CUENCA “Monocyclopentadienyl phenoxo-amino and phenoxo-amido titanium complexes. Synthesis, characterisation, and reactivity of asymmetric metal centre derivatives”, *Eur. J. Inorg. Chem.*, 14: 4638-4649 (2008)

R. ARTEAGA-MÜLLER, J. SÁNCHEZ-NIEVES, J. RAMOS, P. ROYO, M.E.G. MOSQUERA “Isolobal Zwitterionic Imido Niobium and Tantalum and Monocyclopentadienyl Zirconium Complexes: Theoretical and Methyl Methacrylate Polymerization Studies”, *Organometallics*, 27: 1417-1426 (2008).

- R. ARTEAGA-MÜLLER, J. SÁNCHEZ-NIEVES, P. ROYO, M.E.G. MOSQUERA "Synthesis and Reactivity of Oxometallacyclic Niobium Compounds with \square , \square -unsaturated Carbonyl Ligands", *Eur. J. Inorg. Chem.*, 2313-2320 (2008)
- L. POSTIGO, A.B. VÁZQUEZ, J. SÁNCHEZ-NIEVES, P. ROYO, E. HERDTWECK "Mono- and Dinuclear Cyclopentadienylsiloxo Titanium Complexes: Synthesis, Reactivity and Catalytic Polymerization Applications", *Organometallics*, 27: 5588-5597 (2008)
- E. DE JESÚS, J.C. FLORES "Dendrimers: Solutions For Catalyst Separation and Recycling", *Ind. & Eng. Chem. Res.*, 47: 7968-7981 (2008)
- J.M. BENITO, E. DE JESÚS, F.J. DE LA MATA, J.C. FLORES, R. GÓMEZ "Carbosilane dendrimers containing complexes N,N'-pyridylimine of molybdenum and platinum at their periphery", *J. Organomet. Chem.*, 693: 278-282 (2008)
- I. DORADO, R. ANDRÉS, E. DE JESÚS, J.C. FLORES "Palladium(II) Complexes of Phosphane Ligands with Ammonium-Functionalized Carbosilane Substituents", *J. Organomet. Chem.*, 693: 2147-2152 (2008)
- P. PÉREZ-PUENTE, E. DE JESÚS, J.C. FLORES, P. GÓMEZ-SAL "Synthesis of 2-(N-arylimino- κ N-methyl)pyrrolide- κ N complexes of nickel" *J. Organomet. Chem.*, 693: 3902-3906 (2008)
- O. GONZÁLEZ-MORAL, A. HERNÁN-GÓMEZ, A. MARTÍN, M. MENA, C. SANTAMARÍA "Group 13 Organoderivatives Supported on a Molecular Metallic Oxide", *Dalton Trans.* 44-46 (2008)
- J.J. CARBÓ, O. GONZÁLEZ-MORAL, A. MARTÍN, M. MENA, J.M. POBLET, C. SANTAMARÍA "Construction of Titanasiloxanes by Incorporation of Silanols to the Metal Oxide Model [$\text{Ti}(\square^5\text{-C}_5\text{Me}_5)(\mu\text{-O})\}_3(\mu_3\text{-CR})$]: DFT Elucidation of the Reaction Mechanism", *Chem. Eur. J.* 14: 7930-7938 (2008)
- J. CABALLO, M. GARCÍA-CASTRO, A. MARTÍN, M. MENA, A. PÉREZ-REDONDO, C. YÉLAMOS "Yttrium and Erbium Halide Complexes with [$\text{Ti}(\square^5\text{-C}_5\text{Me}_5)(\square\text{-NH})\}_3(\square_3\text{-N})$] as a Neutral Tridentate Ligand", *Inorg. Chem.* 47: 7077-7079 (2008)
- A. MARTÍN, N. MARTÍNEZ-ESPADA, M. MENA, M.E.G. MOSQUERA, A. PÉREZ-REDONDO, C. YÉLAMOS "Mercury or Silver Atoms Bridging Trinuclear Titanium Imido-Nitrido Systems", *Chem. Commun.* 6561-6563 (2008)
- P. ORTEGA, J.L. COPA-PATIÑO, M.A. MUÑOZ-FERNANDEZ, J. SOLIVERI, R. GÓMEZ, F.J. DE LA MATA "Amine and ammonium fictionalization of chloromethylsilane-ended dendrimers. Antimicrobial activity studies", *Org. & Biomol. Chem.* 6: 3264-3269 (2008)
- N. WEBER, P. ORTEGA, M.I. CLEMENTE, D. SHCHARBIN, M. BRYSEWSKA, F.J. DE LA MATA, R. GÓMEZ, M.A. MUÑOZ-FERNANDEZ "Characterization of carbosilane dendrimers as effective carriers of siRNA to HIV infected lymphocytes", *J. of Controlled Released* 132: 55-64 (2008)
- M. OMEDES, P. GOMEZ-SAL, J. ANDRIES, A. MOYANO "Diastereoselective addition of organozinc and organomagnesium reagents to 2-(2'-pyrimidyl)ferrocenecarbaldehyde", *Tetrahedron.*, 64: 3953-3959 (2008)
- J. RUIZ, M.J. ANTON, M. VIVANCO, M.E.G. MOSQUERA, R. QUESADA " $\text{D}^+\text{-}\pi\text{-A}^-$ Charge-Transfer Molecules Based on Tricyanoquinodimethane and Diphosphine Metal Complexes", *Inorganic Chemistry*, 47: 5540-5542 (2008)

VII. TESIS DOCTORALES

ALBERTO SÁNCHEZ MÉNDEZ “Estructuras dendriméricas de metales de transición con ligandos tipo “escorpionato” y carbeno N-heterocíclico”, Directores: Juan Carlos Flores Serrano y Ernesto de Jesús Alcañiz, Sobresaliente Cum Laude, (04-04-2008) Universidad de Alcalá.

OLGA BUITRAGO MARTÍN “Síntesis, caracterización y reactividad de complejos de metales del grupo 4 que contienen el ligando “ $\eta^5\text{-C}_5\text{Me}_4\text{SiMe}_2\text{Cl}$ ”. Derivados cloro, Alquilo, metileno, oxo y siloxano”, Directores: Tomás Cuenca Agreda y Gerardo Jiménez Pindado, Sobresaliente Cum Laude, (28-11-2008) Universidad de Alcalá.

VIII. ORGANIZACIÓN DE CONGRESOS

J. TOMÁS CUENCA AGREDA “Conferencia Científica: La Química Organometálica en España”, Universidad de Alcalá, 1.200 € (02/06/08)

IX. ESTANCIAS EN OTROS CENTROS

CRISTINA PANIAGUA PANIAGUA “Ring-opening polymerisation of cyclic esters using Group 4 sulfonamide complexes”, University of Oxford, United Kingdom (09/06/08 al 04/09/08)

NOELIA MARTÍNEZ ESPADA “Coordinación de cicloalcanos orgánicos a metales del Grupo 11”, University of Bath, United Kingdom (01/07/08 al 01/10/08)

ADRIÁN PÉREZ REDONDO “Single-crystal X-ray diffraction studies on inorganic and organic compounds” University of Bristol, United Kingdom (01/05/08 al 31/08/08)