

MEMORIA DE INVESTIGACIÓN 2008

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)
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)
Montalvo García, Gemma (PCD)
Frutos Gaite, Luis Manuel (RyC)
Palmeiro Uriach, Raúl (PAD)
Rodríguez Laguna, M^a Teresa (PAD)
Diez Fernández, Raúl (PA)
Gallego Castro, Javier Vicente (PA)
Panadero Esteban, M^a Isabel (PA)
Pozo Guerrero, M^a Pilar del (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 (Ayudas de Iniciación en la Actividad Investigadora)
González Álvarez, María José (FPI-JCCM)
González Álvarez, María José (FPU-MEC)

I.4 CONTRATADOS DE INVESTIGACIÓN

Frutos Gaité, Luis Manuel (Programa Ramón y Cajal)
Sancho Rey, Unai (FPI-CM)

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 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.

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 afectan 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.

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. Profesores: Miguel Angel Estesó Díaz y Carmen Teijeiro Ferreira.

III. PUBLICACIONES

III.1 ARTÍCULOS DE INVESTIGACIÓN EN REVISTAS ESPECIALIZADAS

Z. LAN, L.M. FRUTOS, A.L. SOBOLEWSKI, W. DOMCKE “Photochemistry of hydrogen-bonded aromatic pairs: quantum dynamical calculations for the pyrrole-pyridine complex”, Proceedings of the National Academy of Sciences USA, 105: 12707-12712 (2008)

C.E. PETRISOR, L.M. FRUTOS, O. CASTAÑO, M.E.G. MOSQUERA, E. ROYO, T. CUENCA “Olefin Isomerization versus Hydrozirconation: A case of Stable β -Hydrogen Containing Zr-Alkyl Derivative”, Dalton Transactions, 2670-2673 (2008)

S.M. BAKALOVA, J. KANETI, O. CASTAÑO “Computational Study of the Electronic Spectra of Some B-N Dyes”, Bulgarian Chem. Communications, 40: 450-455 (2008)

A. STRAMBI, P. BRAÑA COTO, L. M. FRUTOS, N. FERRÉ, M. OLIVUCCI “Relationship between the Excited State Relaxation Paths of Rhodopsin and Isorhodopsin”, The Journal of the American Chemical Society, 130: 3382-3388 (2008)

M. J. GONZÁLEZ-ÁLVAREZ, P. BALBUENA, C. ORTIZ MELLET, J. M. GARCÍA FERNÁNDEZ, F. MENDICUTI “Study of the Conformational and Self-Aggregation Properties of 2¹,3¹-O-(o-Xylylene)-per-O-Me- α - and - β -cyclodextrins by Fluorescence and Molecular Modelling”, Journal of Physical Chemistry B, 112: 13717-13729 (2008)

R. USERO, C. ALVARIZA, M.J. GONZÁLEZ-ÁLVAREZ, F. MENDICUTI “Complexation of Dimethyl 2,3-Naphthalenedicarboxylate with 2-hydroxypropyl- α -, - β - and - γ -cyclodextrins in aqueous solution by Fluorescence, Circular Dichroism and Molecular Mechanics Journal of Fluorescence”, 18: 1103-1114 (2008)

G. RAQUEL DE FRANCISCO, M.J. GONZÁLEZ-ÁLVAREZ, F. MENDICUTI “Fluorescence properties of (R)- and (S)-[1,1'-Binaphthalene]-2,2'-diols solutions and their Complexes with Cyclodextrins in Aqueous Medium”, Journal of Photochemistry and Photobiology, 200: 114-125 (2008)

G. CRAVOTTO, F. MENDICUTI, K. MARTINA, S. TAGLIAPIETRA, B. ROBALDO, A. BARGE “Microwave-promoted Huisgen Cycloaddition to prepare Homo- and Hetero-Dimers of α -, β - and γ -Cyclodextrin”, Synlett, 17: 2642-2646 (2008)

G. A. CARRIEDO, F.J. GARCÍA ALONSO, J.L. GARCÍA ÁLVAREZ, A. PRESA SOTO, J.I. FIDALGO. M.P. TARAZONA, M.T.R. LAGUNA, G. MARCELO, F. MENDICUTI, E. SAIZ “Experimental and theoretical study of the acidic degradation of poly(2,2'-dioxy-1,1'-biphenyl)phosphazene Macromolecules, 41(22): 8483-8490 (2008)

V. ABET, A. NÚÑEZ, F. MENDICUTI, C. BURGOS, J. ALVAREZ-BUILLA “A new class of pyrazolopyridine nucleus with fluorescent properties, obtained through either a radical or a Pd arylation pathway from N-azinylpyridinium N-aminides”, Journal of Organic Chemistry, 73: 8800-8807 (2008)

J. POZUELO, M.M. LÓPEZ-GONZÁLEZ, M. TENKLOPATCHEV, E. SAIZ, E. RIANDE “Simulations of Gas Transport in Membranes Based on Polynorbornenes Functionalized with Substituted Imide Side Groups”, Journal of Membrane Science, 310: 474-483 (2008)

A. CARRIEDO, A. PRESA SOTO, M.L. VALENZUELA, M.P. TARAZONA, E. SAIZ “Experimental and theoretical study of the hydrolytical stability of isolable poly (2,2'-dioxy-1,1'-biphenoxyphosphazene)s with [NPCl₂] units”, *Macromolecules*, 41: 1881-1885 (2008)

L. GARRIDO, M.M. LÓPEZ-GONZÁLEZ, E. SAIZ, E. RIANDE “Molecular Basis of Carbon Dioxide Transport in Polycarbonate Membranes”, *The Journal of Physical Chemistry B*, 112: 4253-4260 (2008)

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*, 21: 62-67 (2008)

A.C.F. RIBEIRO, C.I.A.V. SANTOS, A. J.M. VALENTE, O.S. ASCENSO, V.M.M. LOBO, H.D. BURROWS, A.M.T.D.P.V. CABRAL, F.J.B. VEIGA, C. TEIJEIRO, M. A. ESTESO “Some Transport Properties of γ -Cyclodextrin Aqueous Solutions at (298.15 and 310.15) K”, *J. Chem. Eng. Data*, 53: 755-759 (2008)

R.R. RAPOSO, E. CALVIÑO, M. A. ESTESO “A new electrochemical method for the determination of gas solubility in aqueous solutions”, *Journal of Electroanalytical Chemistry*, 617: 157-163 (2008)

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”, *J. Molecular Liquids*, 140: 73-7 (2008)

A.C.F. RIBEIRO, M.C.F. BARROS, A.S.N. TELES, A.J.M. VALENTE, V.M.M. LOBO, A.J.F.N. SOBRAL, M.A. ESTESO, “Diffusion coefficients and electrical conductivities for calcium chloride aqueous solutions at 298.15 K and 310.15 K”, *Electrochim. Acta*, 54: 192-6 (2008)

III.2 CAPÍTULOS DE LIBROS DE INVESTIGACIÓN

O. CASTAÑO, U. SANCHO, M. GARAVELLI, M. OLIVUCCI, L.M. FRUTOS “The Role of Intersection Space Segments in Photochemical Reactions”, *AIP Conference Proceedings CP963*, 2:594-597 (2008)

L.M. FRUTOS, A.U. ACUÑA, O. CASTAÑO “New Computational Approaches in the Study of Nonvertical Triplet Energy Transfer”, *AIP Conference Proceedings CP963*, 2:623-626 (2008)

M.T. RODRÍGUEZ, G. MONTALVO, D. MARÍN, M. VALIENTE “Uso de la plataforma virtual WebCT como estrategia de aprendizaje activo de la Química Física”, *III Encuentro sobre Innovación en Docencia Universitaria. Alcalá de Henares (2008)* http://www2.uah.es/aprace/otros/Uso_2008.pdf

G. MONTALVO, M. VALIENTE “Rheology of the Soybean Lecithin/Oleic Acid/Water and Soybean Lecithin/ Ethyl Oleate/ Water Systems”, 289-291 *IBEREO: Iberian Meeting on Rheology 2008*, ISSN: 978-84-608-0779-7, Madrid (2008)

IV. ESTANCIAS DE INVESTIGADORES EXTRANJEROS

JOSÉ Y. KANETI “Exploración *In Silico* de una nueva clase de cromóforos en base al Pirrometeno de Boro”, *Ayuda Giner de los Ríos, Academia de ciencias de Bulgaria (01/03/08 al 30/06/08)*

ANA CRISTINA F. RIBEIRO “Difusión en sistemas cuaternarios: disoluciones que incluyen fármacos y ciclodextrinas”, *Programa Erasmus, Universidad de Coimbra, Portugal (15/12/08 al 18/12/08)*

V. ESTANCIAS EN OTROS CENTROS

MIGUEL ÁNGEL ESTESO DÍAZ “Propiedades de transporte de sistemas conteniendo ciclodextrinas”, *Facultad de Ciencias de la Universidad de Coimbra, Portugal (05/05/08 al 07/07/08)*