

# MEMORIA DE INVESTIGACIÓN 2003 – 2004

## Datos Identificativos

**CURSO ACADÉMICO:** 2003 - 2004

**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 ASOCIADOS**  
Gallego Castro, Javier Vicente  
Montalvo García, Gemma  
Palmeiro Uriach, Raúl  
Pozo Guerrero, Pilar del  
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 OTRAS TITULACIONES**

Laura Rubio Sanz, Técnico Superior en Análisis y Control, C. Madrid - FINNOVA.

- **BECARIOS LICENCIADOS PREDOCTORALES**

Luis Manuel Frutos Gaité, Licenciado en Química, Vic. Investigación - Finalización Tesis Doctorales.

Unai Daniel Sancho Rey, Licenciado en Química, Vic. Investigación - FPI

Luis Manuel Frutos Gaité, Licenciado en Química, MEC-For. Profesorado.

María Antonia Sanz De Pascual, Licenciada en Química, Vic. Investigación - Finalización Tesis Doctorales.

Antonio Di Marino, Licenciado en Química, Proyecto M<sup>o</sup> Ciencia y Tecnología.

Gema Marcelo Alejandro, Licenciada en Química, MEC-For. Profesorado.

## II. LÍNEAS DE INVESTIGACIÓN

### ÁREA: QUÍMICA FÍSICA

Modelo de Unión del PLP a enzimas. Código UNESCO: 2210.03.

Estudio de reacciones catalizadas por 5' fosfato de piridoxal en condiciones no enzimáticas. Código UNESCO: 2210.01.

Comportamiento físico y reológico de tensioactivos. Código UNESCO: 2210.04.

Polifosfacenos. Código UNESCO: 2304.07.

Propiedades conformacionales. Código UNESCO: 2304.08.

Poliésteres. Código UNESCO: 2304.14.

Ciclodextrinas y sus Complejos de Inclusión con moléculas pequeñas y polímeros. Código UNESCO: 2210.16.

Formación de Profesores de Ciencias. Código UNESCO: 5803.02.

Didáctica de Ciencias. Resolución de Problemas de Química. Código UNESCO: 5801.99.

Estudio de la estructura, estabilidad termodinámica y reactividad de compuestos de interés químico, biológico y farmacéutico. Código UNESCO: 2210.23.

Caracterización electroquímica de antineoplásicos y de su acción biológica. Biosensores. Lipofilia. Código UNESCO: 2210.05.

Propiedades estructurales, espectroscópicas y proceso fotoquímicos y de transferencia de energía en compuesto de interés en química orgánica y bioorgánica. Código UNESCO: 2210.20.

## III. PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN

### III.1. Proyectos I+D

OBIS DIONISIO CASTAÑO GONZÁLEZ "Propiedades estructurales, espectroscópica y procesos fotoquímicos y de transferencia de energía en compuestos de interés en química orgánica y biorgánica". Dirección General de Investigación, BQU2003-07281, 95.900,00 €, (15 nov 03 - 14 nov 04).

## IX. PUBLICACIONES

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

N. GRANIZO, C. THUNIG, M. VALIENTE "The effect of octyl glucoside on the lamellar phase of diluted C<sub>12</sub>E<sub>4</sub> and alcohol systems". Journal of Colloid and Interface Science, 273: 638-644, (2004), Estados Unidos.

L.M. FRUTOS, U. SANCHO, O. CASTAÑO "Triplet versus singlet photoreaction mechanism in the barrelene di- $\pi$ -methane rearrangement". Organic Letters, 6 (8): 1229-1231, (2004), Estados Unidos.

L.M. FRUTOS, O. CASTAÑO "A theory of nonvertical triplet energy transfer in terms of accurate potential energy surfaces: The transfer reaction from  $\pi, \pi^*$  triplet donors to 1,3,5,7-cyclooctatetraene". Journal of Chemical Physics, 120(3): 1208-1216, (2004), Estados Unidos

M. DRACINSKY, O. CASTAÑO "Calculations of interaction energies of ellipticine derivatives with DNA base pairs". Phys. Chem. Chem. Phys, 6: 1799-1805, (2004).

- J.F. ESPINOSA, M.J. FERNÁNDEZ, K. B. GRANT, L. GUDE, M.M. RODRIGO, A. LORENTE "Synthesis, DNA intercalation and europium(III)-triggered DNA photocleavage by a bis-proflavine succinamide conjugate". *Tetrahedron Letters*, 45: 4017-4020, (2004), Holanda.
- G.A. CARRIEDO, J.L. GARCÍA ÁLVAREZ, F.J. GARCÍA ALONSO, A. PRESA SOTO, M.P. TARAZONA, F. MENDICUTI, G. MARCELO "Thermal atropisomerization and photoluminescence spectra of very high glass transition temperature chiral poly(binaphthoxyphosphazenes) with a secondary helicoidal structure". *Macromolecules*, 37: 5437-5443, (2004), Estados Unidos.
- A. DI MARINO, F. MENDICUTI "Thermodynamics of complexation of dimethyl esters of tere-, iso-, and phthalic acids with  $\alpha$ - and  $\beta$ -cyclodextrins". *Applied Spectroscopy*, 58 (7): 823-830, (2004), Estados Unidos.
- G. MARCELO, M.P. TARAZONA, E. SAIZ "Conformational properties of poly(diallyldimethyl ammonium chloride) (PDDA) determined by combination of molecular dynamics, rotational isomeric states and Monte Carlo procedures". *Polymer*, 45: 1321-1330, (2004).
- G. MARCELO, E. SAIZ, M.P. PILAR TARAZONA "Unperturbed dimensions of Carrageenans in different salt solutions". *Biophysical Chemistry*, 113: 201-208, (2004).

## IX.2 CAPÍTULOS DE LIBROS DE INVESTIGACIÓN INTERNACIONALES

- C.A. HELFER, F. MENDICUTI, W.L. MATTICE "Steady-State Fluorescence". *Comprehensive Desk Reference of Polymer. Characterization and Analysis*, (2003), Estados Unidos, ISBN: 0841236658.

## X. COMUNICACIONES A CONGRESOS

### X.1 INTERNACIONALES

- N. GRANIZO, M. ÁLVAREZ, G. MONTALVO, M. VALIENTE "Effect of octyl  $\beta$ ,d-glucopyranoside on rheological behavior of diluted and concentrated lamellar phases". 18<sup>th</sup> Conference of the European Colloid and Interface Society, P455, (19-sep-04), España, (Comunicación).
- O. LÓPEZ, J. PEREIRA, M. CÓCERA, M. VALIENTE, C. LÓPEZ-IGLESIAS, N. GRANIZO, R. PONS "Use of freeze fracture electron microscopy for studying microstructures in surfactant systems". 18<sup>th</sup> Conference of the European Colloid and Interface Society, P4.66, (19-sep-04), España, (Comunicación).
- L.M. FRUTOS, O. CASTAÑO, A.U. ACUÑA "The computation of activation energies in triplet energy transfer reactions. The application to the stilbene triplet formation". XX IUPAC Symposium on Photochemistry, OC-27, (17-jul-04), España, (Comunicación).
- P.S. DENKOVA, L.M. FRUTOS, V.S. DIMITROV, J. KANETI, O.D. CASTAÑO "Conformational analysis of donor-acceptor ethenes: NMR lineshape and relaxation time techniques, coupled with CASSCF/CASPT2 calculations". XX IUPAC Symposium on Photochemistry, P-74, (17-jul-04), España, (Comunicación).
- U. SANCHO, L.M. FRUTOS, O. CASTAÑO "Substituent effect in barrelene-like compounds di- $\pi$ -methane rearrangement". XX IUPAC Symposium on Photochemistry, P-286, (17-jul-04), España, (Comunicación).
- L.M. FRUTOS, O. CASTAÑO "Chaos, bifurcations and conical intersections in photochemistry". Second Humboldt Conference on Computational Chemistry, 27, (1-sep-04), Bulgaria, (Comunicación).
- U. SANCHO, L.M. FRUTOS, O. CASTAÑO "Triplet-triplet energy transfer in di- $\pi$ -methane rearrangement". Second Humboldt Conference on Computational Chemistry, 76, (1-sep-04), Bulgaria, (Comunicación).
- L. SERNA, A. DI MARINO, F. MENDICUTI "Study of the inclusion complexes of a bichromophoric diester containing naphthalene and anthracene with  $\alpha$ - and  $\beta$ -cyclodextrins. Fluorescence and molecular modelling". XX IUPAC Symposium on Photochemistry, P-296, (17-jul-04), España, (Comunicación).
- J. POZUELO, F. MENDICUTI "Molecular dynamics simulations of poly(dimethyl siloxane) inside  $\alpha$ -,  $\beta$ - and  $\gamma$ -cyclodextrin channels". 12<sup>th</sup> International Symposium on Cyclodextrins, P-036, (16-may-04), Francia, (Comunicación).
- A. DI MARINO, F. MENDICUTI "Thermodynamics study of inclusion complexes of 1-methyl naphthoate and  $\alpha$ - and  $\beta$ -cyclodextrins". 12<sup>th</sup> International Symposium on Cyclodextrins, P-099, (16-may-04), Francia, (Comunicación).
- E.A. CASTRO, G.R. ECHEVARRÍA, A. OPAZO, P.S. ROBERT, J.G. SANTOS "Poly(L-Lysine) and poly(Lysine-Phenylalanine). Potentiometric titration and kinetic studies". 40<sup>th</sup> International Symposium on Macromolecules, P4.1-84, (4-jul-04), Francia,
- J. POZUELO, F. MENDICUTI "Molecular Dynamics simulations of poly(dimethyl siloxane) inside  $\alpha$ -,  $\beta$ - and  $\gamma$ -cyclodextrin channels". 12<sup>th</sup> International Cyclodextrin Symposium, 225-228, (16-may-04), Francia, (Comunicación).
- A. DI MARINO, F. MENDICUTI "Thermodynamics study on inclusion complexes of 1-methyl naphthoate with  $\alpha$ - and  $\beta$ -cyclodextrins". 12<sup>th</sup> International Cyclodextrin Symposium, 459-462, (16-may-04), Francia, (Comunicación).

## **X.2 NACIONALES**

D. MARÍN, C. TEIJEIRO, P. PÉREZ DE LUELMO, E. DE LA RED "Agentes antineoplásicos alquilantes y sus interacciones con el ADN: caracterización electroquímica". XXVI Reunión Bienal del Grupo de Electroquímica de la RSEQ, L29-31, (12-abr-04), Córdoba, (Comunicación).

E.A. CASTRO, G.R. ECHEVARRÍA, A. OPAZO, P.S. ROBERT, J.G. SANTOS "Estudio cinético de la reacción de poli-l-lisina con aril acetatos". IX Simposio Latinoamericano de Polímeros, C-5-5, (11-jul-04), Valencia, (Comunicación).

G. MARCELO, M.P. TARAZONA, E. SAIZ "Comportamiento del cloruro de poli(acrilamida-Co-dialildimetil amonio) en disolución". IX Simposio Latinoamericano de Polímeros, C-5-34, (11-jul-04), Valencia, (Comunicación).

M.M. LÓPEZ-GONZÁLEZ, E. SAIZ, E. RIANDE "Estudio teórico-experimental de procesos de sorción de gases (N<sub>2</sub> y O<sub>2</sub>) en filmes de policarbonato". IX Simposio Latinoamericano de Polímeros, C-7-10, (11-jul-04), Valencia, (Comunicación).

E. SAIZ "Caracterización de polímeros en disolución mediante técnicas experimentales y teóricas". IX Simposio Latinoamericano de Polímeros, C-8, (11-jul-04), Valencia, (Ponencia).

## **XIV. TESIS DOCTORALES**

---

LUIS MANUEL FRUTOS GAITE "Propiedades fotoquímicas y fotofísicas de hidrocarburos insaturados". Director: Obis D. Castaño González, Sobresaliente cum laude, (27-jul-04), Universidad de Alcalá.

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

---

G. MONTALVO "Discusión científica de resultados". Departamento de Química Física, Universidad de Lund, Lund (Suecia), (01 ene 04 - 01 feb 04).

## **XVIII. ESTANCIAS DE INVESTIGADORES VISITANTES**

---

J.G. SANTOS BLANCO "Proyecto BQU-2003-07281". Departamento de Química Física, Universidad de Alcalá, Alcalá de Henares (Madrid), España, (01 jun 04 - 29 jul 04).