

DEPARTAMENTO DE Química
Física

DEPARTAMENTO DE QUÍMICA FÍSICA

Director: Prof. Dr. D. Miguel Ángel Esteso Díaz

✉ Universidad de Alcalá
Edificio Farmacia. Campus Universitario. Ctra. Madrid-Barcelona, Km. 33,600
Alcalá de Henares (Madrid)
☎ *Teléfono:* 918854639
Fax: 918854763

Áreas de conocimiento:

- Química Física

ÁREA DE CONOCIMIENTO: QUÍMICA FÍSICA

Actividades de investigación

Proyectos de investigación

- *Tipo:* PROYECTOS INVESTIGACIÓN
Contribución de los genes *ndh* a la eficiencia energética y producción de entropía en fotosíntesis
Director: Bartolomé Sabater García
Fecha Inicio: 01/01/2011
Fecha Fin: 31/12/2013
- *Tipo:* PROYECTOS INVESTIGACIÓN
Estudio computacional del efecto sustituyente en S-nitrosotioles
Director: Manuel Temprado Morena
Entidad Financiadora: Consejería Educación y Cultura (Comunidad de Madrid)
Presupuesto: 14.000 Euros.
Fecha Inicio: 01/01/2011
Fecha Fin: 31/12/2011

Publicaciones y actividades de difusión de resultados

Publicaciones en revistas científicas internacionales

- Ana C.F. Ribeiro; Abílio J.F.N. Sobral; Victor M.M. Lobo; Miguel Ángel Esteso Díaz
Título: Estimation of the Mean Distance of Closest Approach of Actinides and Lanthanides Ions in Aqueous Solutions: Some Experimental and Theoretical Calculations
Nombre Revista: Acta Chimica Slovenica
Volumen: 58
Página Inicio: 797
Página Fin: 801
ISSN/Revista: 1318-0207
Fecha Publicación: 2011
- Ana C.F. Ribeiro; Joselaine C.S. Gomes; Cecilia Isabel Alves Ventura Santos; Victor M.M. Lobo; Miguel Ángel Esteso Díaz; Derek G. Leaist
Título: Ternary Mutual Diffusion Coefficients of Aqueous NiCl₂ + NaCl and NiCl₂ + HCl Solutions at 298.15 K
Nombre Revista: Journal of Chemical and Engineering Data
Volumen: 56
Página Inicio: 4696
Página Fin: 4699
ISSN/Revista: 0021-9568
Fecha Publicación: 2011
- Francisco J. de la Mata de la Mata; Paula Ortega Lopez; Beatriz Macarena Covaleta Siles; José Manuel Hernández Ros; María Elena Fuentes Paniagua; Javier Sánchez-Nieves Fernández; M. Pilar Tarazona Lafarga; José L. Copa Patiño; Juan Soliveri de Carranza; Rafael Gómez Ramírez
Título: Hyperbranched Polymers versus dendrimers containing a carbosilane framework and terminal ammonium groups as antimicrobial agents
Nombre Revista: Organic and Biomolecular Chemistry

Página Inicio: 5238

Página Fin: 5248

ISSN/Revista: 1477-0520

Fecha Publicación: 15/04/2011

- Juan J. Vaquero López; Julio Álvarez-Builla Gómez; Ana María Cuadro Palacios; Teresa Tatiana Cañeque Cobo; Marco Antonio Ramirez; Francisco Mendicuti Madrid; Koen Clays; Inge Asselbergh
Título: Novel linear and V-shaped D-pi-A+-pi-D chromophores by Sonogashira reaction
Nombre Revista: Arkivoc
Volumen: 3
Página Inicio: 140
Página Fin: 154
ISSN/Revista: 1551-7012
Fecha Publicación: 2011
- Luis Manuel Frutos Gaité; Igor Schapiro; Mikhail Nikolaevich Ryazantsev; Nicolas Ferre; Roland Lindh; Massimo Olivucci
Título: The Ultrafast Photoisomerizations of Rhodopsin and Bathorhodopsin Are Modulated by Bond Length Alternation and HOOP Driven Electronic Effects
Nombre Revista: Journal of the American Chemical Society
Nº Revista: 133
Volumen: 10
Página Inicio: 3354
Página Fin: 3364
ISSN/Revista: 0002-7863
Fecha Publicación: 22/02/2011
- M. José González Álvarez; Alejandro Méndez-Ardoy; Juan M. Benito; José M. García Fernández; Francisco Mendicuti Madrid
Título: Self-association of a naphthalene-capped-beta-cyclodextrin through cooperative strong hydrophobic interactions
Nombre Revista: Journal of Photochemistry and Photobiology A: Chemistry
Volumen: 223(1)
Página Inicio: 25
Página Fin: 36
ISSN/Revista: 1010-6030
Fecha Publicación: 2011
- M. Paz San Andrés Lledó; S. Vera; Mercedes Torre Roldán; Mercedes Valiente Martínez
Título: Retinol fluorescence in lecithin/n-butanol/water aggregates: a new improvement for its analysis in cosmetics without pretreatment
Nombre Revista: Analytical and Bioanalytical Chemistry
Volumen: 399
Página Inicio: 851
Página Fin: 859
ISSN/Revista: 1618-2642
Fecha Publicación: 2011
- Manuel Temprado Morena; Maria Victoria Roux Arrieta; Francisco Ros; Rafael Notario Bueno; Marta Segura; James S. Chickos
Título: Thermophysical study of several barbituric acid derivatives by Differential Scanning Calorimetry (DSC)
Nombre Revista: Journal of Chemical and Engineering Data
Volumen: 56
Página Inicio: 263
Página Fin: 268
ISSN/Revista: 0021-9568
Fecha Publicación: 2011

- Marco Marazzi; Unai Sancho Rey; Obis D. Castaño González; Luis Manuel Frutos Gaité
Título: First Principles Study of Photostability Within Hydrogen-Bonded Amino Acids
Nombre Revista: Physical Chemistry Chemical Physics
Volumen: 13
Página Inicio: 7805
Página Fin: 7811
ISSN/Revista: 1463-9076
Fecha Publicación: 20/01/2011
- María Teresa Muñoz Fernández; Carmen Urbaneja; Manuel Temprado Morena; Marta Elena González Mosquera; José T. Cuenca Agreda
Título: Lewis Acid Fragmentation of a Lithium Aryloxide Cage: Generation of New Heterometallic Aluminium-Lithium Species.
Nombre Revista: Chemical Communications
Volumen: 47
Página Inicio: 11757
Página Fin: 11759
ISSN/Revista: 1359-7345
Fecha Publicación: 28/09/2011
- Maria Victoria Roux Arrieta; Manuel Temprado Morena; Pilar Jiménez Sierra; Rafael Notario Bueno; Archana R. Parameswar; Alexei V. Demchenko; James S. Chickos; Carol A. Deakyne; Joel F. Liebman
Título: Knowledge of a molecule: An Experimental and Theoretical Study of the Structure and Enthalpy of Formation of Tetrahydro-2H-1,3-oxazine-2-thione
Nombre Revista: Journal of Chemical and Engineering Data
Volumen: 56
Página Inicio: 4725
Página Fin: 4732
ISSN/Revista: 0021-9568
Fecha Publicación: 2011
- Maria Victoria Roux Arrieta; Rafael Notario Bueno; Concepción Foces Foces; Manuel Temprado Morena; Francisco Ros; Vladimir N. Emel'yanenko; Sergey P. Verevkin
Título: Experimental and Computational Thermochemical Study of Barbituric Acids: Structure-Energy Relationship in 1,3-dimethylbarbituric Acid
Nombre Revista: The journal of physical chemistry. A, Molecules, spectroscopy, kinetics, environment & general theory
Volumen: 115
Página Inicio: 3167
Página Fin: 3173
ISSN/Revista: 1089-5639
Fecha Publicación: 2011
- Marta Camacho-Artacho; Valentina Abet; Luis Manuel Frutos Gaité; Federico Gago Badenas; Julio Álvarez-Builla Gómez; Carolina Burgos García
Título: Unusual Approach to 3-Aryl-2-aminopyridine through a Radical Mechanism: Synthesis and Theoretical Rationale from Quantum Mechanical Calculations
Nombre Revista: Journal of Organic Chemistry
Nº Revista: 76
Volumen: 5
Página Inicio: 1452
Página Fin: 1455
ISSN/Revista: 0022-3263
Fecha Publicación: 25/01/2011

- Mercedes Valiente Martínez; Ana Belén Cortés Fuentes; Michael Gradzieski; L Noirez; R Schweins
Título: A SANS investigations of micelles in mixtures of cetyltrimethylammonium bromide (CTAB)/octyl-beta-D-glucopyranoside (C8G1) in water/glycerol solvent
Nombre Revista: Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects
Volumen: 375
Página Inicio: 117
Página Fin: 123
ISSN/Revista: 0927-7757
Fecha Publicación: 2011

- Miguel Ángel Esteso Díaz; Ana C.F. Ribeiro; Abílio J.F.N. Sobral; Susana M.N. Simões; Marisa C.F. Barros; Victor M.M. Lobo; Ana M.T.D.P.V. Cabral; Francisco J.B. Veiga; Cecilia Isabel Alves Ventura Santos
Título: Transport properties of aqueous solutions of sodium alginate at 298.15 K
Nombre Revista: Food Chemistry
Volumen: 125
Página Inicio: 1213
Página Fin: 1218
ISSN/Revista: 0308-8146
Fecha Publicación: 2011

- Miguel Ángel Esteso Díaz; Ana C.F. Ribeiro; Joselaine C.S. Gomes; Marigese B.B.J. Rita; Victor M.M. Lobo
Título: Ternary Diffusion Coefficients of Nickel Chloride plus Theophylline plus Water at 298.15 K
Nombre Revista: Food Chemistry
ISSN/Revista: 0308-8146
Fecha Publicación: 2011

- Miguel Ángel Esteso Díaz; Ana C.F. Ribeiro; Joselaine C.S. Gomes; Marisa C.F. Barros; Victor M.M. Lobo
Título: Diffusion Coefficients of Nickel Chloride in Aqueous Solutions of Lactose at 298.15 K and 310.15 K
Nombre Revista: Journal of Chemical Thermodynamics
Volumen: 43
Página Inicio: 270
Página Fin: 274
ISSN/Revista: 0021-9614
Fecha Publicación: 2011

- Miguel Ángel Esteso Díaz; Ana C.F. Ribeiro; Marigese B.B.J. Rita; Abílio J.F.N. Sobral; Victor M.M. Lobo
Título: Estimation of the Mean Distance of Closest Approach of Some Heavy -Metal Ions in Aqueous Solutions: Some Experimental and Theoretical Calculations
Nombre Revista: Molecular Simulation
ISSN/Revista: 0892-7022
Fecha Publicación: 2011

- Miguel Ángel Esteso Díaz; Ana C.F. Ribeiro; Marigese B.B.J. Rita; Joselaine C.S. Gomes; Victor M.M. Lobo
Título: Diffusion of Calcium Gluconate in Aqueous Solutions of Lactose at 298.15 K
Nombre Revista: Food Chemistry
Volumen: 126
Página Inicio: 1186
Página Fin: 1189
ISSN/Revista: 0308-8146
Fecha Publicación: 2011

- Miguel Ángel Esteso Díaz; Ana C.F. Ribeiro; Marisa C.F. Barros; Victor M.M. Lobo; Abílio J.F.N. Sobral; Sonia I.G. Fangaia; Pedro M.G. Nicolau; Fernando A.D.R.A. Guerra
Título: Interaction between calcium chloride and some carbohydrates as seen by mutual diffusion at 25 °C and 37 °C
Nombre Revista: Food Chemistry
Volumen: 124
Página Inicio: 842
Página Fin: 849
ISSN/Revista: 0308-8146
Fecha Publicación: 2011
- Miguel Ángel Esteso Díaz; Artur J.M. Valente; Ana C.F. Ribeiro; Marigese B.B.J. Rita; Rui A. Carvalho; Victor M.M. Lobo
Título: The effect of beta-cyclodextrin on the transport properties of calcium lactate: supramolecular interaction or hydration effect?
Nombre Revista: Journal of Molecular Liquids
ISSN/Revista: 0167-7322
Fecha Publicación: 2011
- Miguel Ángel Esteso Díaz; Cecilia Isabel Alves Ventura Santos; Victor M.M. Lobo; Ana C.F. Ribeiro
Título: Effect of Potassium Chloride on Diffusion of Theophylline at T = 298.15 K
Nombre Revista: Journal of Chemical Thermodynamics
Volumen: 43
Página Inicio: 873
Página Fin: 875
ISSN/Revista: 0021-9614
Fecha Publicación: 2011
- Natalí Fernandez-Peña; Thais Carmona Pérez; M. Pilar Tarazona Lafarga; Enrique Saiz García; Francisco Mendicuti Madrid
Título: An experimental and theoretical study of the Carbazole to Carbazole intramolecular energy transfer in N-Vinyl Carbazole/Vinyl tert-butyl-benzoate copolymers of different molar compositions
Nombre Revista: Polymer International
Volumen: 60
Página Inicio: 1487
Página Fin: 1496
ISSN/Revista: 0959-8103
Fecha Publicación: 2011
- Xiaochen Cai; Subhojit Majumdar; George C. Fortman; Catherine S. J. Cazin; Alexandra M. Z. Slawin; Charles Lhermitte; Rajeev Prabhakar; Meaghan E Germain; Taryn Pallucio; Steven P. Nolan; Elena V. Rybak Akimova; Manuel Temprado Morena; Burjor Captain; Carl D. Hoff
Título: Oxygen Binding to [Pd(L)(L')] (L = NHC, L' = NHC or PR₃, NHC = N-Heterocyclic Carbene). Synthesis and Structure of a Paramagnetic trans-[Pd(NHC)₂(eta¹-O₂)₂] Complex
Nombre Revista: Journal of the American Chemical Society
Volumen: 133
Página Inicio: 1290
Página Fin: 1293
ISSN/Revista: 0002-7863
Fecha Publicación: 2011
- Xiaochen Cai; Subhojit Majumdar; George C. Fortman; Luis Manuel Frutos Gaité; Manuel Temprado Morena; Christopher R. Clough; Christopher C. Cummins; Meaghan E Germain; Taryn Pallucio; Elena V. Rybak Akimova; Carl D. Hoff
Título: Thermodynamic, Kinetic and Mechanistic Study of Oxygen Atom Transfer from Mesityl Nitrile Oxide to Phosphines, and a Metal Phosphido Complex
Nombre Revista: Inorganic Chemistry

Nº Revista: 19
Volumen: 50
Página Inicio: 9620
Página Fin: 9630
ISSN/Revista: 0020-1669
Fecha Publicación: 2011

Colaboraciones en obras colectivas

- *Autor:* Ana C.F. Ribeiro; Victor M.M. Lobo; Artur J.M. Valente; Ana M.T.D.P.V. Cabral; Francisco J.B. Veiga; Sonia I.G. Fangaia; Pedro M.G. Nicolau; Fernando A.D.R.A. Guerra; Miguel Ángel Esteso Díaz
Título Colaboración: Transport Properties and their Impact on Biological Systems
Título Obra: Advances in Chemistry Research
ISBN: 978-1-61324-018-2
Editorial: Nova Science Pilischers Inc
- *Autor:* Ana C.F. Ribeiro; Victor M.M. Lobo; Cecilia Isabel Alves Ventura Santos; Miguel Ángel Esteso Díaz
Título Colaboración: Diffusion of caffeine in different aqueous media at physiological temperature
Título Obra: Caffeine. Chemistry, Analysis, Function and Effects
Editorial: Royal Society of Chemistry
- *Autor:* M. José González Álvarez; Francisco Mendicuti Madrid
Título Colaboración: Dicroísmo Circular Aplicado a Sistemas Supramoleculares
Título Obra: Terceras Jornadas de Jóvenes Investigadores de la Universidad de Alcalá
Página Inicio: 339
Página Fin: 350
ISBN: 978-84-8138-925-8
- *Autor:* Marco Marazzi; Unai Daniel Sancho Rey; Obis D. Castaño González; Luis Manuel Frutos Gaité
Título Colaboración: Efecto de la radiación ultravioleta sobre proteínas: Un estudio computacional
Título Obra: Terceras Jornadas de Jóvenes Investigadores de la Universidad de Alcalá
Página Inicio: 319
Página Fin: 328
ISBN: 978-84-8138-925-8
Editorial: Universidad de Alcalá (UAH)
- *Autor:* Miguel Ángel Esteso Díaz
Título Obra: Avances de la Electroquímica en Iberoamérica, Portugal y España
ISBN: 978-84-8138-937-1
- *Autor:* Natalí Fernández-Peña; M. Pilar Tarazona Lafarga; Francisco Mendicuti Madrid
Título Colaboración: Caracterización de polímeros en disolución
Título Obra: Terceras Jornadas de Jóvenes Investigadores de la Universidad de Alcalá
Página Inicio: 329
Página Fin: 338
ISBN: 978-84-8138-925-8
- *Autor:* Thais Carmona; Francisco Mendicuti Madrid
Título Colaboración: Fluorescencia en sistemas complejos: Complejación de ciclodextrinas
Título Obra: Terceras Jornadas de Jóvenes Investigadores de la Universidad de Alcalá
Página Inicio: 307
Página Fin: 318
ISBN: 978-84-8138-925-8

- *Autor:* Thais Carmona Pérez; Francisco Mendicuti Madrid
Título Colaboración: Fluorescencia en sistemas complejos: Complejación con Ciclodextrinas
Título Obra: Terceras Jornadas de Jóvenes Investigadores de la Universidad de Alcalá
Página Inicio: 307
Página Fin: 317
ISBN: 978-84-9138-925-8

Ponencias y Comunicaciones a congresos

- Cecilia Isabel Alves Ventura Santos; Ana C.F. Ribeiro; Miguel Ángel Estesó Díaz
Título: Physico-Chemical characterization of Drug-Cyclodextrin interactions in aqueous media
Evento: International Symposium on Chemistry of Solutions
Fecha Desde: 18/09/2011
Fecha Hasta: 22/09/2011
Ciudad: Villa de Leyva
País: Colombia
Tipo Participación: Póster
- Felipe Zapata Ruiz; Raúl Palmeiro Uriach; Obis D. Castaño González; Luis Manuel Frutos Gaité
Título: Using analytical potential energy surfaces in the dynamics of some interesting photochemical systems
Evento: WATOC 2011
Fecha Desde: 17/07/2011
Fecha Hasta: 22/07/2011
Año Publicación: 2011
Tipo Participación: Póster
- Igor Schapiro; Mikhail Nikolaevich Ryazantsev; Luis Manuel Frutos Gaité; Nicolas Ferre; Roland Lindh; Massimo Olivucci
Título: Using trajectories to probe the molecular mechanism of ultrafast biological photoisomerization and internal conversion
Evento: 242nd ACS National Meeting & Exposition, Denver, CO, United States
Fecha Desde: 28/08/2011
Fecha Hasta: 01/09/2011
Año Publicación: 2011
Ciudad: Denver, CO
País: Estados Unidos
Tipo Participación: Ponencia
- Janire Peña-Bahamonde; J.Joaquin Ateinsa; Javier Pozuelo de Diego; M. Pilar Tarazona Lafarga; Francisco Mendicuti Madrid
Título: Characterization of some polyrotaxanes in solution by fluorescence and other techniques
Evento: 2nd European Conference on Cyclodextrins
Fecha Desde: 02/10/2011
Fecha Hasta: 04/10/2011
Ciudad: Asti
País: Italia
Tipo Participación: Comunicación
- Luis Manuel Frutos Gaité
Título: Prediction and quantification of the coordinates controlling excitation energies: from energy transfer to optical excitation
Evento: Excited states and non-adiabatic processes in complex systems. Theoretical approaches" WATOC 2011 Satellite Meeting
Fecha Desde: 25/07/2011
Fecha Hasta: 27/07/2011

Año Publicación: 2011

Tipo Participación: Ponencia Invitada

- Luis Manuel Frutos Gaité
Título: Insight into the photoisomerization mechanism of the primary event in vision by QM/MM molecular dynamics simulations
Evento: "Excited states and non-adiabatic processes in complex systems. Theoretical approaches" WATOC 2011 Satellite Meeting
Fecha Desde: 25/07/2011
Fecha Hasta: 27/07/2011
Año Publicación: 2011
Tipo Participación: Comunicación
- Luis Manuel Frutos Gaité; A. Ulises Acuña Fernández; Obis D. Castaño González
Título: Non-vertical Triplet-triplet Energy Transfer in condensed phase: definition and quantification of the reaction coordinate
Evento: III Jornadas Ibéricas de Fotoquímica
Fecha Desde: 07/09/2011
Fecha Hasta: 09/09/2011
Año Publicación: 2011
Tipo Participación: Comunicación
- Luis Manuel Frutos Gaité; Felipe Zapata Ruiz; Marco Marazzi; A. Ulises Acuña Fernández; Obis D. Castaño González
Título: Definition of the triplet energy transfer reaction coordinate
Evento: "Simulations in Organic Chemistry" WATOC 2011 Satellite Meeting
Fecha Desde: 15/07/2011
Fecha Hasta: 16/07/2011
Año Publicación: 2011
Tipo Participación: Ponencia Invitada
- Luis Manuel Frutos Gaité; Felipe Zapata Ruiz; Marco Marazzi; Ulises Acuña; Obis D. Castaño González
Título: Definition of the triplet energy transfer reaction coordinate
Evento: Simulation in Organic Chemistry
SimOC 2011
Fecha Desde: 15/07/2011
Fecha Hasta: 16/07/2011
Tipo Participación: Comunicación
- M. José González Álvarez; Thais Carmona Pérez; Francisco Mendicuti Madrid
Título: Circular Dichroism in Supramolecular Systems with Cyclodextrins
Evento: 13th International Conference on Chiroptical Spectroscopy
Fecha Desde: 24/07/2011
Fecha Hasta: 28/07/2011
Ciudad: Oxford
País: Reino Unido
Tipo Participación: Póster
- M. Pilar Tarazona Lafarga; Gema Marcelo Alejandre; Enrique Saiz García; J.M.G. Martinho; J.P.S. Farinha
Título: SEC-MALS and Molecular Dynamics Characterization of an Amphiphilic Poly(Acrylic Acid-b-Styrene-b-Styrene-b-Acrylic Acid) Symmetric Block-Copolymer Synthesized by RAFT
Evento: European Polymer Congress 2011-XII congress of the GEP
Fecha Desde: 26/06/2011
Fecha Hasta: 01/07/2011
Tipo Participación: Comunicación

- M. Teresa Rodríguez Laguna
Título: Generación de la wiki collgloscitex.pbworks.com (COLLaborative GLOssary of SCientific TEXts) como contexto de alfabetización científico-tecnológica multidimensional.
Evento: VI Reunión del Innovación Docente en Química
Fecha Desde: 19/07/2011
Fecha Hasta: 21/07/2011
Tipo Participación: Ponencia
- Manuel Temprado Morena; Luis Manuel Frutos Gaité; Xiaochen Cai; Subhojit Majumdar; Carl D. Hoff
Título: Computational Study of the Reaction Mechanism of the Oxidation of Phosphines by Nitrile Oxides
Evento: WATOC-2011
Fecha Desde: 17/07/2011
Fecha Hasta: 22/07/2011
Año Publicación: 2011
Tipo Participación: Póster
- Marco Marazzi; Luis Manuel Frutos Gaité; Isabelle Navizet; Roland Lindh
Título: Ultrafast internal conversion as a possible mechanism of photostability in gamma-crystallin
Evento: WATOC 2011
Fecha Desde: 17/07/2011
Fecha Hasta: 22/07/2011
Tipo Participación: Comunicación
- María Victoria Roux Arrieta; Manuel Temprado Morena; Pilar Jiménez Sierra; Rafael Notario Bueno; Archana R. Parameswar; Alexei V. Demchenko; James S. Chickos; Joel F. Liebman
Título: Thermochemical Properties of Tetrahydro-1,3-oxazine-2-thione: a Calorimetric and Computational Study
Evento: Thermodynamics 2011
Fecha Desde: 31/08/2011
Fecha Hasta: 03/09/2011
Año Publicación: 2011
Ciudad: Atenas
País: Grecia
Tipo Participación: Póster
- María Victoria Roux Arrieta; Manuel Temprado Morena; Rafael Notario Bueno; Francisco Ros; Marta Segura; James S. Chickos
Título: Thermophysical Study by DSC of Several Barbituric Acid Derivatives
Evento: 19th European Conference on Thermophysical Properties
Fecha Desde: 28/08/2011
Fecha Hasta: 01/09/2011
Año Publicación: 2011
Ciudad: Thessaloniki
País: Grecia
Tipo Participación: Póster
- Miguel Ángel Estesó Díaz
Título: Determination of diffusion coefficients for aqueous solutions of charged porphyrins
Evento: International Symposium on Chemistry of Solutions
Fecha Desde: 18/09/2011
Fecha Hasta: 22/09/2011
Ciudad: Villa de Leyva
País: Colombia
Tipo Participación: Conferencia Plenaria/Magistral

- Natalia Mayordomo Herránz; M. José González Álvarez; Patricia Balbuena; Carmen Ortiz Mellet; José M. García Fernández; Francisco Mendicuti Madrid
Título: Comparative Study of the Association into dimers between a native and a permethylated alfa-Cyclodextrin containing a Xylylene moiety at the secondary face
Evento: 2nd European Conference on Cycloedxtrins
Fecha Desde: 02/10/2011
Fecha Hasta: 04/10/2011
Ciudad: Asti
País: Italia
Tipo Participación: Póster
- Thais Carmona; Luisa Boffa; Giancarlo Cravotto; Francisco Mendicuti Madrid
Título: Thermodynamics of the complexation of mono- and bis-beta-cyclodextrin derivatives with 2,6-naphthalenedicarboxylate methyl ester in aqueous solution
Evento: 2nd European Conference on Cycloedxtrins
Fecha Desde: 02/10/2011
Fecha Hasta: 04/10/2011
Ciudad: Asti
País: Italia
Tipo Participación: Póster
- Thais Carmona Pérez; Katia Martina; Giancarlo Cravotto; Francisco Mendicuti Madrid
Título: Thermodynamics of the complexation of mono- and bis-beta-cyclodextrin derivatives with 2,6-naphthalenedicarboxylate methyl ester in aqueous solution
Evento: II European Conference on Cyclodextrins
Fecha Desde: 02/10/2011
Fecha Hasta: 04/10/2011
Ciudad: Asti
Tipo Participación: Comunicación
- Victor M.M. Lobo; Ana C.F. Ribeiro; Artur J.M. Valente; Joaquim J.S. Natividade; Miguel Ángel Esteso Díaz
Título: Transport of electrolytes and non-electrolytes in different media
Evento: 7th International Conference on Diffusion in Solids and Liquids (DSL2011)
Fecha Desde: 26/06/2011
Fecha Hasta: 30/06/2011
Ciudad: Algarve
País: Portugal
Tipo Participación: Póster

Actividades de formación y movilidad de personal investigador

Estancias en otros centros

- Marco Marazzi
Título: Local Scaling of the CASPT2//CASSCF Energy Gradient for on the fly Excited State Semiclassical Dynamics
Centro Externo: Chemistry Department, Bowling Green State University
País: Estados Unidos
Duración: 28/07/2011 a 25/10/2011.
Tipo: Estancias en otro Centro
- Miguel Ángel Esteso Díaz
Título: Estancia de investigación sobre "Propiedades termodinámicas y de transporte en disolución"
Centro Externo: Facultad de Ciências e Tecnologia - Universidad de Coimbra
País: Portugal

Duración: 09/05/2011 a 08/07/2011.

Tipo: Estancia en Régimen de Sabático

- Raúl Palmeiro Uriach
Título: Semiclassical dynamics on potential energy surfaces with a valley bifurcation point by solving of Liouville's equation
Centro Externo: Universidad de Coimbra
País: Portugal
Duración: 17/07/2011 a 22/08/2011.
Tipo: Postdoctoral

Actividades de investigación

Tesis Doctorales

- Caracterización de polímeros fotoconductores mediante cromatografía con detección múltiple, técnicas de fluorescencia y mecánica y dinámica molecular
Autor: Natalí Fernández-Peña
Director: Francisco Mendicuti Madrid; M. Pilar Tarazona Lafarga
Fecha de Lectura: 11/2011
Universidad: Universidad de Alcalá (UAH)

Publicaciones y actividades de difusión de resultados

Participación en comites de I+D

- *Tipo Participación:* XI Semana de la Ciencia
Título: Explorando el nano-mundo atómico y molecular
Investigador: Marco Marazzi
Centro: Facultad de Farmacia
Fecha Inicio: 15/11/2011
Fecha Fin: 17/11/2011
Tipo: Organizador
- *Título:* -Miembro del "Editorial Board" de la revista "ISNR Physical Chemistry" Ed. Hindawii (<http://www.isrn.com/journals/physchem/>)
Centro: Facultad de Farmacia
Fecha Inicio: 01/06/2011
Tipo: Comités científicos de revistas

Actividades de Difusión Científica

- *Responsable:* González Álvarez, M. José
Investigador: Thais Carmona Pérez; Natalia Mayordomo Herranz; M. Pilar Tarazona Lafarga; Francisco Mendicuti Madrid
Semana de la Ciencia de Madrid con la actividad titulada "Polímeros...¡Nada es lo que parece!"
Fecha Inicio: 14/11/2011
Fecha Fin: 16/11/2011
Tipo: Charla divulgativa
- *Investigador:* Luis Manuel Frutos Gaité; Marco Marazzi; Felipe Zapata Ruiz; Manuel Temprado Morena
Inmersión en el "nano-mundo" molecular, a través de simulaciones moleculares por ordenador de procesos químicos y biológicos con actividades interactivas

Fecha Inicio: 15/11/2011

Fecha Fin: 17/11/2011

Descripción: XI Semana de la Ciencia Madrid

Tipo: Feria

- *Investigador:* M. José González Álvarez
"Química en Acción"
Fecha Inicio: 2011
Tipo: Charla divulgativa
- *Investigador:* Gemma Montalvo García
10ª Ed. Química en Acción
Fecha Inicio: 2011
Lugar: Alcalá de Henares
Descripción: Divulgación de sencillos experimentos "la química cotidiana" dirigidos a estudiantes de bachillerato y organizados por la facultad de Química de la UAH
Tipo: Charla divulgativa

