

DEPARTAMENTO DE QUÍMICA
FÍSICA

DEPARTAMENTO DE QUÍMICA FÍSICA

Director: Prof. Dr. D. Gerardo R. Echevarría Gorostidi

✉ 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
Elaboración e implementación de rúbricas para la calificación de diversas tareas planteadas en asignaturas b-learning de Química Física a través del aula virtual.
Director: M. Teresa Rodríguez Laguna
Fecha Inicio: 31/10/2009
Fecha Fin: 31/10/2010
- *Tipo:* PROYECTOS INVESTIGACIÓN
Desarrollo de un método de escalamiento local de gradiente CASSCF//CASPT2 para dinámicas semiclásicas
Director: Luis Manuel Frutos Gaite
Entidad Financiadora: Consejería Educación y Cultura (Comunidad de Madrid)
Presupuesto: 19.661 Euros.
Fecha Inicio: 01/01/2009
Fecha Fin: 31/12/2009
- *Tipo:* PROYECTOS INVESTIGACIÓN
Conformación y dinámica de polímeros y sus estructuras supramoleculares: Polímeros fotoconductores, polirrotaxanos y polielectrólitos
Director: Francisco Mendicuti Madrid
Entidad Financiadora: Dirección General de Investigación (Ministerio)
Presupuesto: 121.000 Euros.
Fecha Inicio: 01/01/2009
Fecha Fin: 31/12/2011

Publicaciones y actividades de difusión de resultados

Publicaciones en revistas científicas internacionales

- Bartolomé Sabater García; M. Dolores Marín Noarbe; Mercedes Martín Marquínez
Título: Entropy decrease associated to solute compartmentalization in the cell
Nombre Revista: Biosystems
Página Inicio: 31
Página Fin: 36
ISSN/Revista: 03032647
Fecha Publicación: 01/10/2009
- Francisco Mendicuti Madrid
Título: Fluorescence, Induced Circular Dichroism and Molecular Mechanics of 1-Methyl Naphthalenecarboxylate complexes with 2-hydroxypropyl Cyclodextrins
Nombre Revista: Journal of Fluorescence

Página Inicio: 449

Página Fin: 462

ISSN/Revista: 1053-0509

Fecha Publicación: 2009

- Francisco Mendicuti Madrid; M. José González Álvarez; Carmen Ortiz-mellet ; Jase Maria García-Fernández ; Jose Vicente
Título: Thermodynamics of the Dimer Formation of 2I,3I-O-(o-Xylylene)-per-O-Me-gamma-cyclodextrin: Fluorescence, Molecular Mechanics and Molecular Dynamics
Nombre Revista: Journal of Fluorescence
Página Inicio: 975
Página Fin: 988
ISSN/Revista: 1053-0509
Fecha Publicación: 2009
- Francisco Mendicuti Madrid; Obis D. Castaño González; Snezhana Bakalova ; José Yanto Kaneti
Título: Design and Photophysics of a New Molecule with a N-B-N Linked Chromophore
Nombre Revista: Chemical Physics Letters
Página Inicio: 206
Página Fin: 210
ISSN/Revista: 0009-2614
Fecha Publicación: 2009
- Luis Manuel Frutos Gaité; Gabino A. Carriedo ; M. Pilar Tarazona Lafarga; Enrique Saiz García
Título: Theoretical study on the mechanism and regioselectivity of the macromolecular substitution reactions of [NPCl₂]_n with bifunctional nucleophiles by a combination of Quantum Mechanical and Molecular Dynamics calculations
Nombre Revista: Macromolecules
Nº Revista: 42
Página Inicio: 8769
Página Fin: 8773
ISSN/Revista: 0024-9297
Fecha Publicación: 10/08/2009
- M. Pilar Tarazona Lafarga; Gema Marcelo Alejandre; Enrique Saiz García
Título: Contribution of size exclusion chromatography, light scattering, viscometry and conductimetry to the study of solution and gel properties of a cationic polyelectrolyte
Nombre Revista: Journal of Liquid Chromatography
Página Inicio: 8769
Página Fin: 8773
ISSN/Revista: 0148-3919
Fecha Publicación: 01/01/2009
- Manuel A. V. Ribeiro da Silva ; Ana Filipa L. O. M. Santos ; José R. B. Gomes ; Maria Victoria Roux Arrieta; Manuel Temprado Morena; Pilar Jiménez Sierra; Rafael Notario Bueno
Título: Thermochemistry of Bithiophenes and Thienyl Radicals. A Calorimetric and Computational Study
Nombre Revista: The journal of physical chemistry. A, Molecules, spectroscopy, kinetics, environment & general theory
Página Inicio: 11042
Página Fin: 11050
ISSN/Revista: 1089-5639
Fecha Publicación: 2009
- Marco Marazzi; Unai Sancho Rey; Obis D. Castaño González; Wolfgang Domcke ; Luis Manuel Frutos Gaité
Título: Photoinduced Proton Transfer as a Possible Mechanism for Highly Efficient Excited-State Deactivation in Proteins

Nombre Revista: The Journal of Physical Chemistry Letters

Página Inicio: 425

Página Fin: 428

ISSN/Revista: 1948-7185

Fecha Publicación: 15/12/2009

- Maria das Dores M. C. Ribeiro da Silva ; Manuel A. V. Ribeiro da Silva ; Vera L. S. Freitas ; Maria Victoria Roux Arrieta; Pilar Jiménez Sierra; Manuel Temprado Morena; Juan Z. Dávalos ; Pilar Cabildo ; Rosa M. Claramunt ; José Elguero
Título: Structural studies of cyclic ureas: 3. Enthalpy of formation of barbital
Nombre Revista: Journal of Chemical Thermodynamics
Página Inicio: 1400
Página Fin: 1407
ISSN/Revista: 0021-9614
Fecha Publicación: 2009
- Maria Victoria Roux Arrieta; Manuel Temprado Morena; Pilar Jiménez Sierra; Concepción Foces Foces; Rafael Notario Bueno; Archana R. Parameswar ; Alexei V. Demchenko ; James S. Chickos ; Carol A. Deakynne ; Alicia K. Ludden ; Joel F. Liebman
Título: Experimental and Theoretical Study of the Structures and Enthalpies of Formation of the synthetic reagents, 1,3-Thiazolidine-2-thione and Oxazolidine-2-thione
Nombre Revista: The journal of physical chemistry. A, Molecules, spectroscopy, kinetics, environment & general theory
Página Inicio: 10772
Página Fin: 10778
ISSN/Revista: 1089-5639
Fecha Publicación: 2009
- Meaghan E Germain ; Manuel Temprado Morena; Annie Castonguay ; Olga P. Kryatova ; Elena V. Rybak Akimova; John J. Curley ; Arjun Mendiratta ; Yi-Chou Tsai ; Christopher C. Cummins ; Rajeev Prabhakar ; James E. McDonough ; Carl D. Hoff
Título: Coordination-Mode Control of Bound Nitrile Radical Complex Reactivity: Intercepting End-on Nitrile-Mo(III) Radicals at Low Temperature
Nombre Revista: Journal of the American Chemical Society
Página Inicio: 15412
Página Fin: 15423
ISSN/Revista: 0002-7863
Fecha Publicación: 2009
- Mercedes Torre Roldán; M. Paz San Andrés Lledó; S. Vera; Gemma Montalvo García; Mercedes Valiente Martínez
Título: Retinol Fluorescence: a Simple Method to Differentiate Different Bilayer Morphologies
Nombre Revista: Colloid and Polymer Science
Página Inicio: 951
Página Fin: 959
ISSN/Revista: 0303-402X
Fecha Publicación: 2009
- Miguel Ángel Esteso Díaz; Ana C.F. Ribeiro ; Ana C.G. Santos ; Victor M.M. Lobo ; Francisco J.B. Veiga ; Ana M.T.D.P.V. Cabral ; Ornella Ortona
Título: Binary Mutual Diffusion Coefficients of Isoniazid Aqueous Solutions at (298.15 and 310.15) K
Nombre Revista: Journal of Chemical and Engineering Data
Página Inicio: 3235
Página Fin: 3237
ISSN/Revista: 0021-9568
Fecha Publicación: 2009

- Miguel Ángel Esteso Díaz; Cecilia Isabel Alves Ventura Santos; Ana C.F. Ribeiro ; Victor M.M. Lobo ; Ana M.T.D.P.V. Cabral ; Francisco J.B. Veiga
Título: Diffusion Coefficients of the Ternary System (2-hydroxypropyl-beta-cyclodextrin + Caffeine + Water) at T = 298.15 K
Nombre Revista: Journal of Chemical Thermodynamics
Página Inicio: 1324
Página Fin: 1328
ISSN/Revista: 0021-9614
Fecha Publicación: 2009
- Miguel Ángel Esteso Díaz; Cecilia Isabel Alves Ventura Santos; Ana C.F. Ribeiro ; Victor M.M. Lobo ; Ana M.T.D.P.V. Cabral ; Francisco J.B. Veiga
Título: Diffusion Coefficients of the Ternary System beta-Cyclodextrin + Caffeine + water at 298.15 K
Nombre Revista: Journal of Chemical and Engineering Data
Página Inicio: 115
Página Fin: 117
ISSN/Revista: 0021-9568
Fecha Publicación: 2009
- Miguel Ángel Esteso Díaz; Cecilia Isabel Alves Ventura Santos; Ana C.F. Ribeiro ; Victor M.M. Lobo ; Hugh D. Burrows ; Artur J.M. Valente ; Ana M. Amado ; Abílio J.F.N. Sobral ; Ana S.N. Teles
Título: Mean distance of closest approach of potassium, cesium and rubidium ions in aqueous solutions: Experimental and theoretical calculations
Nombre Revista: Journal of Molecular Liquids
Página Inicio: 69
Página Fin: 73
ISSN/Revista: 0167-7322
Fecha Publicación: 2009
- Patrick Achord ; Etsuko Fujita ; James T. Muckerman ; Brian Scott ; George C. Fortman ; Manuel Temprado Morena; Xiaochen Cai ; Burjor Captain ; Derek Isrow ; John J. Weir ; James E. McDonough ; Carl D. Hoff
Título: Experimental and Computational Studies of Enthalpies of Binding of Dinitrogen, Nitriles, Azides, Diazoalkanes, Pyridine and Pyrazines to Mo(PiPr₃)₂(CO)₃
Nombre Revista: Inorganic Chemistry
Página Inicio: 7891
Página Fin: 7904
ISSN/Revista: 0020-1669
Fecha Publicación: 2009

Colaboraciones en obras colectivas

- *Autor:* Gemma Montalvo García; Mercedes Valiente Martínez
Título Colaboración: Rheological Properties of Systems Containing Sugar-Based Surfactants
Título Obra: Sugar-Based Surfactants: Fundamentals and Applications
Página Inicio: 245
Página Fin: 274
ISBN: 978-1-4200-5166-7
Editorial: Taylor & Francis Group, LLC.

Ponencias y Comunicaciones a congresos

- Ana C.F. Ribeiro ; Cecilia Isabel Alves Ventura Santos; Miguel Ángel Esteso Díaz; Victor M.M. Lobo ; Abílio J.F.N. Sobral ; Sonia I.G. Fangaia ; Pedro M.G. Nicolau ; Fernando A.D.R.A. Guerra ; Marisa C.F. Barros
Título: Transport Properties of Calcium Chloride with some Carbohydrates at 298.15 K and 310.15 K
Evento: XXX Reunión del Grupo Especializado de Electroquímica de la RSEQ, XI Encontro Ibérico de Electroquímica
Fecha Desde: 19/07/2009
Fecha Hasta: 22/07/2009
Tipo Participación: Comunicación
- Carolina Burgos García; Julio Álvarez-Builla Gómez; Valentina ABET ; Francisco Mendicuti Madrid; Araceli Núñez Ventura
Título: A New Class Of Pyrazolopyridine Nucleus Obtained Through Both A Radical Or A Direct Arylation Pathway From N-Azinyldipridinium N-Aminides
Evento: 2nd EuCheMS Chemistry Congress
Fecha Desde: 07/09/2009
Fecha Hasta: 14/09/2009
Ciudad: Torino
País: Italia
Tipo Participación: Póster
- Cecilia Isabel Alves Ventura Santos; Ana C. F. Ribeiro ; Victor M. M. Lobo ; Marisa C. F. Barros ; Artur J. M. Valente ; M. Carmen Teijeiro Ferreira; Miguel Ángel Esteso Díaz
Título: Propiedades de transporte de la teofilina en disoluciones acuosas con diferentes valores de pH
Evento: XXX Reunión del Grupo Especializado de Electroquímica de la RSEQ y XI Encontro Ibérico de Electroquímica
Fecha Desde: 19/07/2009
Fecha Hasta: 22/07/2009
Tipo Participación: Comunicación
- Francisco Mendicuti Madrid; Alba María Ortiz Álvarez; Alberto Sánchez Méndez; Juan Carlos Flores ; María Pilar Gomez Sal; Ernesto de Jesús Alcañiz
Título: Complejos de Paladio con ligandos Carbeno NHC dendronizados
Fecha Desde: 06/2009
Tipo Participación: Comunicación
- Francisco Mendicuti Madrid; M. José González Álvarez
Título: Self-association of cyclodextrins by fluorescence and molecular modelling
Evento: XXIV International Conference on Photochemistry
Fecha Desde: 19/07/2009
Fecha Hasta: 24/07/2009
Tipo Participación: Comunicación
- Francisco Mendicuti Madrid; Thais Carmona Pérez; Enrique Saiz García; M. Pilar Tarazona Lafarga; Natali Paz Fernández Peña
Título: Caracterización de copolímeros de N-Vinil carbazol/vinil tert butil benzoato de distinta composición molar.
Evento: XI Reunión del Grupo Especializado de Polímeros (RSEQ RSEF)
Fecha Desde: 20/09/2009
Fecha Hasta: 24/09/2009
Tipo Participación: Comunicación

- Francisco Mendicuti Madrid; Thais Carmona Pérez; Natali Paz Fernández Peña; Enrique Saiz García; M. Pilar Tarazona Lafarga
Título: Excímeros y transferencia de energía intramolecular en disoluciones de copolímeros de N-vinil Carbazol/vinil tert-butil benzoato de distinta composición molar
Evento: IX Congreso de Fotoquímica
Fecha Desde: 20/09/2009
Fecha Hasta: 23/09/2009
Tipo Participación: Comunicación

- Gemma Montalvo García; M. Teresa Rodríguez Laguna; Javier Vicente Gallego Castro; M. Dolores Marín Noarbe
Título: Online assessment as a teaching strategy in chemistry and physical chemistry
Evento: International Conference of Education, Research and Innovation
Fecha Desde: 16/11/2009
Fecha Hasta: 18/11/2009
ISBN/ISSN: 978-84-613-2953-3
Tipo Participación: Póster

- Luis Manuel Frutos Gaité; Obis D. Castaño González; A. Ulises Acuña Fernández; Massimo Olivucci ; wolfgang domcke
Título: Computational Study of Photoinduced Energy, Proton and Electron Transfer in Biological and Chemical Systems
Evento: XXIV International Conference on Photochemistry (ICP)
Fecha Desde: 2009
Tipo Participación: Ponencia Invitada

- M. Pilar Tarazona Lafarga
Título: Caracterización de copolímeros de N-Vinil carbazol/vinil tert butil benzoato de distinta composición molar.
Evento: Congreso: XI Reunión del Grupo Especializado de Polímeros (RSEQ RSEF)
Fecha Desde: 2009
Fecha Hasta: 2009
Tipo Participación: Comunicación

- M. Pilar Tarazona Lafarga
Título: Excímeros y transferencia de energía intramolecular en disoluciones de copolímeros de N-vinil Carbazol/vinil tert-butil benzoato de distinta composición molar
Fecha Desde: 2009
Fecha Hasta: 2009
Tipo Participación: Comunicación

- M. Teresa Rodríguez Laguna
Título: Experiencias "elearning" en las asignaturas del área de Química Física de la Escuela Universitaria de Magisterio de la UAH
Evento: XVII Jornadas Universitarias de Tecnología Educativa
Fecha Desde: 08/09/2009
Fecha Hasta: 08/09/2009
Año Publicación: 2009
ISBN/ISSN: 978-84-692-5551-3
Tipo Participación: Mesa redonda

- Marco Marazzi; Unai Sancho Rey; Obis D. Castaño González; Wolfgang Domcke ; Luis Manuel Frutos Gaité
Título: Photoinduced Proton Transfer Reaction Paths in a Poliglycine Model. A CASSCF//CASPT2 Study
Evento: XXIV International Conference on Photochemistry

Fecha Desde: 19/07/2009

Fecha Hasta: 24/07/2009

Año Publicación: 2009

Tipo Participación: Póster

- Marco Marazzi; Unai Sancho Rey; Obis D. Castaño González; Wolfgang Domecke ; Luis Manuel Frutos Gaité
Título: A possible mechanism for photostability in polyglycine: description of photoinduced proton transfer reaction paths at the CASSCF//CASPT2 level of theory
Evento: IX Congreso de Fotoquímica
Fecha Desde: 21/09/2009
Fecha Hasta: 23/09/2009
Tipo Participación: Comunicación
- Maria Victoria Roux Arrieta; Manuel Temprado Morena; Concepción Foces Foces; Pilar Jiménez Sierra; Rafael Notario Bueno
Título: Termoquímica Experimental y Computacional de Tio y Ditiocarbamatos
Evento: XXXII Reunión de la Real Sociedad Española de Química
Fecha Desde: 13/09/2009
Fecha Hasta: 18/09/2009
Tipo Participación: Ponencia
- Maria Victoria Roux Arrieta; Manuel Temprado Morena; Pilar Jiménez Sierra; Rafael Notario Bueno; Concepción Foces Foces; Archana R. Parameswar ; Alexei V. Demchenko ; James S. Chickos ; Carol A. Deakynne ; Alicia K. Ludden ; Joel F. Liebman
Título: Thermochemical Properties of 3H-Benzoxazole-2-Thione and 3H-Benzothiazole-2-Thione: A Calorimetric And Computational Study
Evento: MEDICTA 2009: The 9th Mediterranean Conference on Calorimetry and Thermal Analysis
Fecha Desde: 15/06/2009
Fecha Hasta: 18/06/2009
Ciudad: Marsella
País: Francia
Tipo Participación: Póster
- Obis D. Castaño González; Luis Manuel Frutos Gaité; Unai Sancho Rey; Marco Marazzi; Ulises Acuña
Título: Photoinduced Energy, Electron and Proton Transfer: A Computational Approach
Evento: XIV International Workshop on Quantum Systems in Chemistry and Physics
Fecha Desde: 13/09/2009
Fecha Hasta: 19/09/2009
Año Publicación: 2009
Tipo Participación: Comunicación
- Raúl Palmeiro Uriach; Obis D. Castaño González; A. J. C. Varandas
Título: Effect of a valley bifurcation point on the semi-classical dynamics.
Evento: Fourteenth International Workshop on Quantum Systems in Chemistry and Physics
Fecha Desde: 13/09/2009
Fecha Hasta: 19/09/2009
Tipo Participación: Póster

Actividades de formación y movilidad de personal investigador

Estancias en otros centros

- Miguel Ángel Esteso Díaz
Título: Estancia de investigación sobre "Propiedades termodinámicas y de transporte en disolución"
Centro Externo: Departamento de Química - Facultad de Ciências - Universidad de Coimbra
País: Portugal
Duración: 01/06/2009 a 27/07/2009.
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: 21/06/2009 a 21/09/2009.
Tipo: Postdoctoral

