

## INFORMACIÓN DE LOS DEPARTAMENTOS

### Departamento de Física Fundamental

Incluimos aquí el resumen de una Tesis Doctoral leída en el año en curso. El resto de las actividades programadas y realizadas por este departamento pueden encontrarse en el Anuario de Investigación editado por la UNED.

#### TESIS DOCTORAL

### Sistemas reométricos de muy baja fricción: desarrollo y aplicación

Isabel Echeverría. Autora

Miguel Ángel Rubio Álvarez y Ignacio Zúñiga López. Directores

Esta tesis ha consistido en el diseño y construcción de un nuevo instrumento de medida. Esto no es muy común, sobre todo en nuestro país. La motivación para construir un nuevo instrumento es casi siempre mejorar o bien la precisión, o bien el rango en que se puede medir una cierta magnitud. Esto normalmente significa una de dos cosas: o se incorporan adelantos técnicos a los dispositivos de detección o se cambia el concepto en el que basa la medida de la magnitud de interés. O las dos.

Un reómetro es un aparato para realizar medidas reológicas, un ejemplo de las cuales es la medida de la viscosidad. La pregunta básica que se hace la reología es: ¿qué ecuación constitutiva, es decir, qué modelo, describe adecuadamente la relación entre la tensión  $\sigma$  y la deformación  $\varepsilon$  en un material?

En un líquido de los llamados newtonianos, la tensión es proporcional a la velocidad de deformación, y la constante de proporcionalidad es la viscosidad. Para encontrar esta relación experimentalmente es necesario controlar la tensión y medir la deformación, o viceversa. Por ejemplo, en el experimento de *creep*, se aplica repentinamente una tensión constante  $\sigma_0$  en  $t = 0$  y se mide la deformación producida en la muestra en función del tiempo  $\varepsilon(t)$ , ver figura 1. Cuando se deja de aplicar el par a la muestra,

parte de la deformación se recupera. La forma de las curvas de la figura 1 depende del y caracteriza al material, si se conoce en un intervalo suficiente de tiempo.

Hagamos un experimento. Pongamos gazpacho en un vaso de la batidora y hagamos funcionar la batidora en el centro. Observamos que el líquido forma una depresión alrededor de la barra. Sin embargo, si hacemos lo mismo con mayonesa, ésta sube por la barra de la batidora. Este fenómeno fue descrito por primera vez en la literatura científica por Garner y Nissan en 1946 pero se conocía desde antes en la industria de pinturas. La explicación, propuesta por Weissenberg, consiste en la existencia de una tensión extra a lo largo de las líneas de corriente (círculos con-

centricos con la barra), cuyo efecto es *extrangular* el líquido forzándolo a acercarse a la barra en contra de la fuerza centrífuga, y a subir en contra de la gravedad. Weissenberg también observó que en un flujo de cizalla entre un cono de ángulo pequeño y un plato, en el caso de da un líquido como la mayonesa es necesaria una fuerza vertical para mantener el cono fijo. Si no se aplica esta fuerza, el plato y el cono se separan. Nosotros queremos medir esta fuerza.

En nuestro caso la muestra se coloca entre dos platos (o entre un cono y un plato) y se produce el flujo de cizalla haciendo girar uno respecto al otro (figura 2). Nuestro reómetro tiene pues que aplicar un par al plato de arriba manteniendo el otro fijo y medir la deformación provocada en la muestra registrando la deflexión angular del plato.

El proyecto consistía en construir un reómetro capaz de medir la fuerza normal con resolución suficiente para poder estudiar disoluciones diluidas en las que el efecto es muy pequeño. Necesitábamos eliminar el rozamiento del plato móvil con cualquier cosa que no fuera la muestra. Esto último ya había sido resuelto de varias formas: cojines de aire, hilos de torsión, levitación magnética. Decidimos basarnos en el aparato de *creep* de Plazek, el cual tiene el rotor suspendido sin tocar nada por medio de un sistema de realimentación. Sin

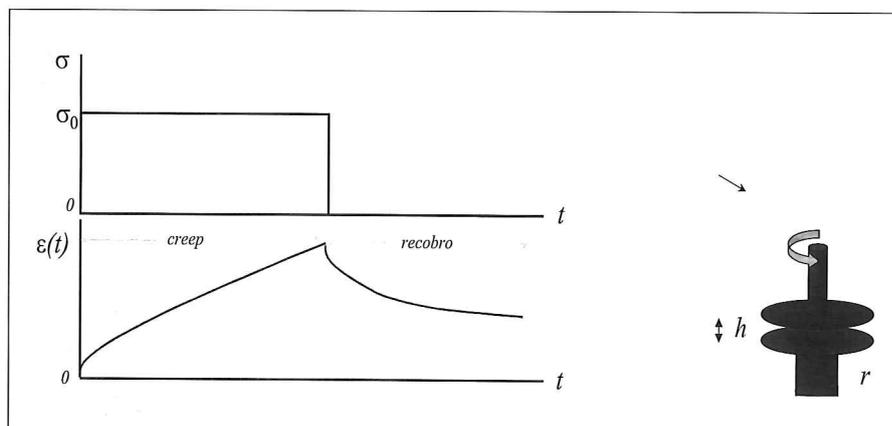


Figura 1. Esquema del experimento de *creep*. En  $t = 0$  se aplica un par constante a la muestra y se mide la deformación producida en la misma. Pasado un cierto tiempo, se retira el par y se mide la recuperación de la deformación (experimento de *recobro*).

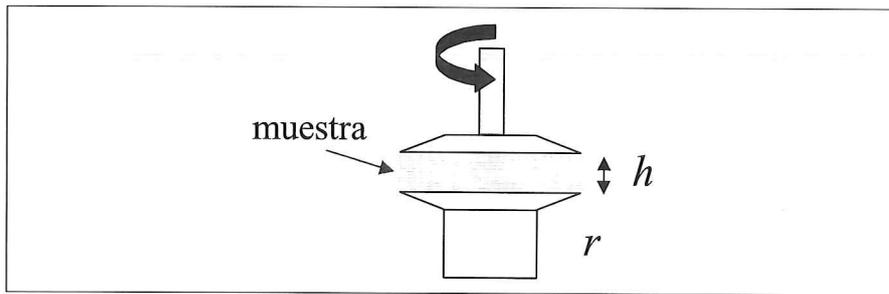


Figura 2. Flujo de cizalla entre dos platos. El plato superior gira con respecto al inferior, mientras éste se mantiene fijo. El radio de los platos es  $r$  y están separados una distancia  $h$ . La tensión  $\sigma$  y la deformación  $\epsilon$  se calculan a partir de estos parámetros y del par  $\tau$  y el ángulo girado por el plato superior  $\theta$ .

embargo, este instrumento no puede medir la fuerza vertical.

Hasta ahora los reómetros capaces de medir la  $F_N$  utilizaban transductores de fuerza, no tenían suficiente resolución y no estaban libres de rozamiento. Decidimos enfocar la medida de una forma nueva. Para suspender magnéticamente el plato de arriba lo unimos a una pieza de hierro que colocamos debajo de un electroimán. La pieza de hierro siente la atracción del campo magnético creado por el electroimán. La intensidad de este campo depende de la corriente que circula por el electroimán, de modo que podemos controlarlo. En lugar de intentar medir directamente cambios en la fuerza, hacemos uso del viejo truco de los galvanómetros y puentes de resistencias: mantengamos cierta magnitud constante y veamos qué tenemos que hacer para conseguirlo. La magnitud que queremos mantener constante es la posición del plato superior y para esto tendremos que variar la corriente que damos al electroimán.

Para estabilizar el plato a una cierta altura se necesita un sistema que controle la corriente que pasa por el electroimán. El sistema tiene que trabajar de modo que si el plato baja se le da más corriente y si sube se le da menos. La idea central del aparato que hemos construido es conseguir que esta posición de equilibrio sea independiente del experimento y utilizar la corriente que se necesita para mantenerla como una medida del empuje que realiza el líquido en la dirección vertical.

Para conseguir esto necesitábamos dos cosas: un detector fiable y un sistema de control adecuado. Ele-

gimos como detector un fotodiodo sensible a la posición. Detectamos la altura del plato por triangulación, por medio de un haz de luz láser que se refleja en un espejo colocado sobre el plato. El sistema de control consigue regular la corriente que pasa por el electroimán de manera que la altura del plato se mantiene constante con una precisión de micras. Si la muestra ejerce una fuerza vertical que tienda a separar los platos, midiendo la corriente extra necesaria para mantener el plato superior en su posición de equilibrio podemos medir esta fuerza vertical con una resolución de 0.2

mN. Por otro lado, con el fin de poder realizar las medidas en condiciones controladas y repetibles, nuestro reómetro tiene que cumplir otros requisitos: debe ser capaz de controlar la tensión aplicada y medir la deformación producida para realizar el experimento que nos permita relacionar las dos magnitudes. Además, para que las medidas tengan sentido deben ser realizadas en condiciones controladas y reproducibles. Por esto hemos diseñado todo un conjunto de sistemas que componen el aparato: una celda termostatazada donde se coloca la muestra; un sistema de vaciado y llenado de gases para la misma, con una bomba de vacío; un motor capaz de producir un par bien controlado pero sin rozamiento mecánico; un detector de deflexión angular de alta resolución; un sistema de toma y almacenamiento de datos. Y todo esto debe estar colocado en un soporte capaz de aislar el aparato de vibraciones externas. El resultado se puede ver en la figura 3 y en el Laboratorio de Sistemas Complejos del Departamento de Física Fundamental.

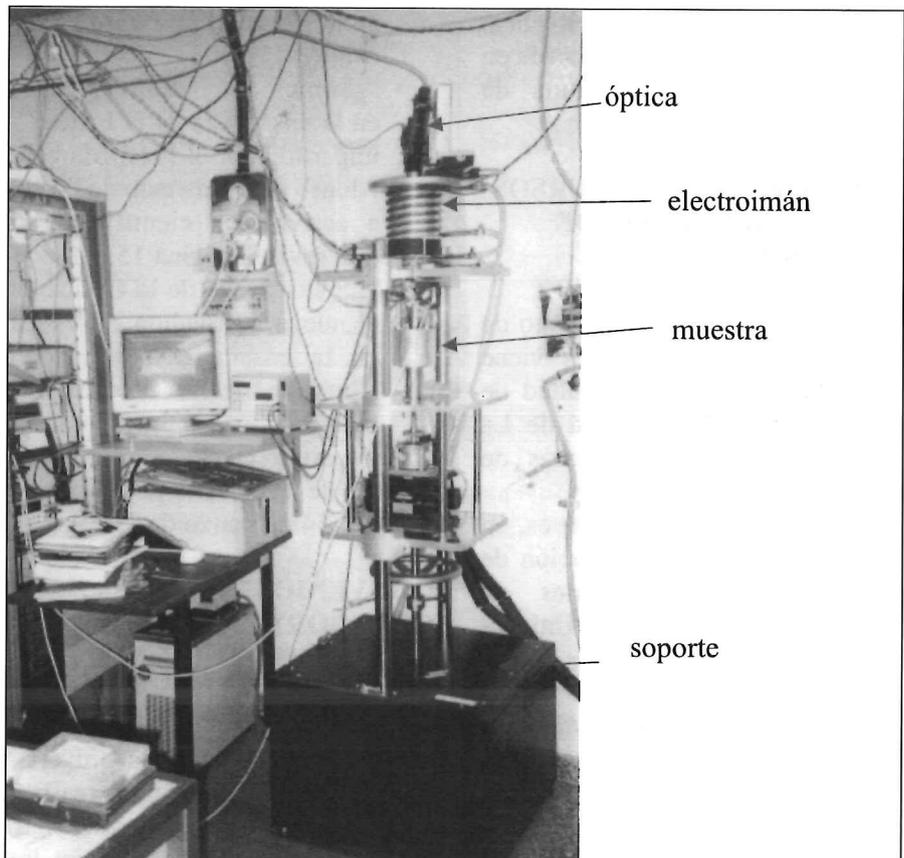


Figura 3. Fotografía del instrumento terminado.

## Departamento de Física de los Materiales

Entre las actividades nuevas realizadas por los profesores de este departamento cabe destacar las siguientes:

### ORGANIZACIÓN DE SEMINARIOS Y CONFERENCIAS

- "Modelos percolativos para la fragmentación nuclear" (28-9-1998), por el Lic. Carlos A. Trallero Herrero, Investigador del Instituto Superior de Ciencias y Tecnologías Nucleares de La Habana (Cuba).
- "Super-redes semiconductoras bajo la acción de radiación láser intensa y de campos magnéticos paralelos a las intercaras" (26-11-1998), por el Prof. Carlos Rodríguez Castellanos, Catedrático de Física Teórica en la Universidad de La Habana (Cuba).
- "Métodos físicos para el estudio de algunos problemas medioambientales" (28-11-1998), por el Prof. Francisco Jaque Rechea, Catedrático de Física Aplicada en la Universidad Autónoma de Madrid.

### ORGANIZACIÓN DE CURSOS DE ACTUALIZACIÓN DE CONTENIDOS

- Desde 1993, el Departamento de Física de los Materiales viene colaborando con la Facultad de Física de la Universidad de La Habana en distintos temas de enseñanza e investigación. Fruto de esta cooperación es, en primer lugar, la organización de **Talleres Internacionales de Enseñanza de la Física Universitaria**, el primero de los cuales se celebró en enero de 1997 (ver número 0 de **100cias@uned**, página 20) y el segundo, que tendrá lugar en enero del año 2000; y, en segundo lugar, la organización de **Cursos de Actualización y Superación en Física para Pro-**

fesores del área centroamericana, que se han realizado en enero de 1998 y 1999 y en los que se han revisado los contenidos de las siguientes materias: Física Cuántica, Electromagnetismo, Termodinámica y Física Estadística.

- Por otra parte, el Director de este Departamento, Prof. Manuel Yuste Llandres, ha sido elegido Presidente del nuevo **Grupo Especializado de Enseñanza de la Física**, recientemente creado en la Real Sociedad Española de Física, cuyo objetivo fundamental es aglutinar en torno a él a todos aquéllos profesores que se dedican a la enseñanza de la Física, en cualquiera de sus niveles educativos.

El Departamento ha organizado conjuntamente con el mencionado Grupo Especializado los siguientes cursos y conferencias:

- "Recent perspectives in the teaching of Physics", conferencia impartida por el Prof. Clifford Swartz, Profesor del Departamento de Física de la Universidad Estatal de New York en Stoney Brook (USA) y Editor de la Revista *The Physics Teacher* (3-11-1998).
- "¿Somos muy conservadores en la enseñanza de la Física?", impartido por el Prof. Marcelo Alonso (ver Apartado dedicado a actividades científicas, en esta revista, página 15).
- "La enseñanza de la Óptica en el nuevo curriculum de Física en la enseñanza secundaria" (Curso teórico/práctico de formación del profesorado), impartido en el Centro Asociado de la UNED en Plasencia (12-14 de marzo de 1999).

### CONVENIOS DE COLABORACIÓN CON OTRAS INSTITUCIONES

- En el marco del convenio con la Facultad de Física de la Universidad de La Habana, se han realizado, o están en fase de realización, trabajos de investigación en las áreas de Óptica y de Física

# BANDRRI

**BAse**

**Nacional de**

**Datos de**

**Referencia para las**

**Radiaciones**

**Ionizantes**

CIEMAT-UNED España

Nuclear, que han dado lugar a publicaciones conjuntas (en revistas científicas de la especialidad, en actas de congresos, en monografías de la UNED (en preparación), ...).

- El Grupo de Física Nuclear de nuestro Departamento, formado por las profesoras María Shaw Martos y Amalia Willliart Torres, ha firmado un acuerdo de cooperación con el Departamento de Ingeniería de Circuitos y Sistemas de la Escuela Universitaria de Ingeniería Técnica de Telecomunicaciones (EUITT) para la realización de Proyectos Fin de Carrera sobre temas de interés común. Fruto de este convenio es la lectura y defensa de dos Proyectos Fin de Carrera y uno más en fase de realización.
- El mismo grupo anterior, junto con el Departamento de Mecánica de la Escuela Técnica Superior de Ingenieros Industriales (ETSII) de la UNED y el Centro de Investigaciones Energéticas, Medioambientales y Tecnológicas (CIEMAT), ha creado una Base Nacional de Datos de Referencia para las Radiaciones Ionizantes (BANDRRI) cuyos objetivos son:
  - Simplificar los procedimientos actuales de consulta de datos atómico-nucleares (Acceso vía

INTERNET: <http://www.cie-mat.es/bandrri>).

- Recomendar valores de referencia para aplicaciones dosimétricas y de radiactividad.
- Mantener la actualización internacional mediante la participación en el International Decay Data Evaluation Project.

Para mayor información puede acudir a la siguiente dirección electrónica: [bandrri@ciemat.es](mailto:bandrri@ciemat.es).

## Departamento de Química Orgánica y Biología

Las actividades científicas más relevantes organizadas en el Departamento de Química Orgánica y Biología durante el año 1998 han sido:

### CONFERENCIAS

El Profesor Doctor **Joaquín Plumet** de la Universidad Complutense de Madrid, en el marco de las prácticas de Química Orgánica II de 4º Curso de Licenciatura, impartió una conferencia sobre química de alto valor añadido titulada: “¿Cómo se pueden preparar inhibidores enzimáticos a partir de la paja?”.



Profesor Dr. Joaquín Plumet.



De izquierda a derecha: Dras. Pilar Cabildo Miranda y Concepción López García, Profesor Jairo Quiroga y Dra. Dionisia Sanz del Castillo en un Acto Académico en la UNED.

Asímismo se recibió la visita de tres Profesores extranjeros que realizaron sendas estancias en el Departamento, pronunciando las conferencias siguientes, resumen de los trabajos de investigación que realizan en sus países.

Profesor Doctor **Jairo Quiroga** de la Universidad del Valle de Cali (Colombia) sobre “**Síntesis de heterociclos fusionados a partir de aminas bifuncionales y compuestos carbonílicos y carboxílicos  $\alpha,\beta$ -insaturados**”.

Profesor Doctor **Sergio Hugo Alarcón** de la Universidad Nacio-

nal de Rosario (Argentina) acerca de “**Dinámica Molecular de la transferencia de protones en el estado fundamental y excitado de sistemas orgánicos**”.

Profesor Doctor **Swiatoslaw Trofimenko** del Departamento de Química y Bioquímica de la University of Delaware (USA) sobre “**Scorpionates: Past, Present and Future**”. El profesor Trofimenko es el denominado padre de los Polipirazolilboratos bautizados por él como *Scorpionates* por su capacidad de actuar como ligandos de coordinación de metales y que han



El Profesor Sergio Hugo Alarcón (sentado en la parte derecha de la foto) en los laboratorios de Química Orgánica con profesores y becarios del Departamento.



El Profesor Swiatoslaw Trofimenko con Don José Antonio Jiménez Guerrero, becario del Departamento.

sido objeto, desde el primer trabajo en 1966, de aproximadamente 1500 artículos científicos en el campo de la química tanto estructural como de aplicaciones tecnológicas.

### SEMINARIOS

Como de costumbre y al objeto de lograr una mayor coordinación entre los Centros Asociados y la Sede Central, en la enseñanza de las asignaturas que son responsabilidad del Departamento, se impartieron en el mes de Noviembre los Seminarios para Profesores Tutores.

La asistencia de los Profesores Tutores del área de Biología y del área de Química Orgánica fue muy numerosa y dio lugar a fructíferas conclusiones en lo que concierne a las líneas de actuación para un mejor desarrollo del curso académico 98-99.

Se informó además que en el curso 1999-2000 el programa de las asignaturas de Química Orgánica I y Química Orgánica (Adaptación) cambiará, pasando a tener los siguientes contenidos:

#### UNIDAD DIDÁCTICA I

1. Introducción a la Química Orgánica.
2. Alcanos.
3. Cicloalcanos.
4. Estereoisomería.

#### UNIDAD DIDÁCTICA II

5. Halogenuros de alquilo: Sustitución Nucleófila Alifática.
6. Halogenuros de alquilo: Reacciones de Eliminación.
7. Alcoholes.
8. Éteres y epóxidos. Compuestos de azufre.

#### UNIDAD DIDÁCTICA III

9. Determinación estructural por métodos espectroscópicos.
10. Alquenos.
11. Dienos.

12. Alquinos.

#### UNIDAD DIDÁCTICA IV

13. El benceno y la sustitución electrófila aromática.
14. Ataque electrófilo y nucleófilo sobre derivados del benceno.
15. El grupo carbonilo: aldehídos y cetonas.
16. Enoles y Enonas. Aldehídos y cetonas  $\alpha,\beta$ -insaturados.

#### UNIDAD DIDÁCTICA V

17. Aminas.
18. Ácidos carboxílicos.
19. Derivados de ácidos carboxílicos.
20. Compuestos difuncionales.

#### UNIDAD DIDÁCTICA VI

21. Compuestos aromáticos policíclicos y heterocíclicos.
22. Carbohidratos.
23. Aminoácidos, péptidos y proteínas. Ácidos nucleicos.
24. Lípidos derivados de acetil coenzima A.

La elaboración de las Unidades Didácticas a editar por la UNED ha sido realizada por las profesoras del Departamento: M<sup>a</sup> Pilar Cabildo Miranda, Amelia García Fraile, Concepción López García y M<sup>a</sup> Dolores Santa María Gutiérrez, y está prevista su aparición en Septiembre de 1999.

## Departamento de Ciencias y Técnicas Fisicoquímicas

### TESIS DOCTORAL

**Derivados antivirales y antitumorales de la 2'-desoxiuridina. Estudio de su estructura e interacciones con moléculas biológicas por espectroscopía de vibración, RMN y métodos teóricos.**

Lorna Elizabeth Bailey. Autora  
Antonio Hernanz Gismero. Director  
Raquel Navarro Delgado. Codirectora

La búsqueda de fármacos destinados a la profilaxis y al tratamiento de las enfermedades virales sigue

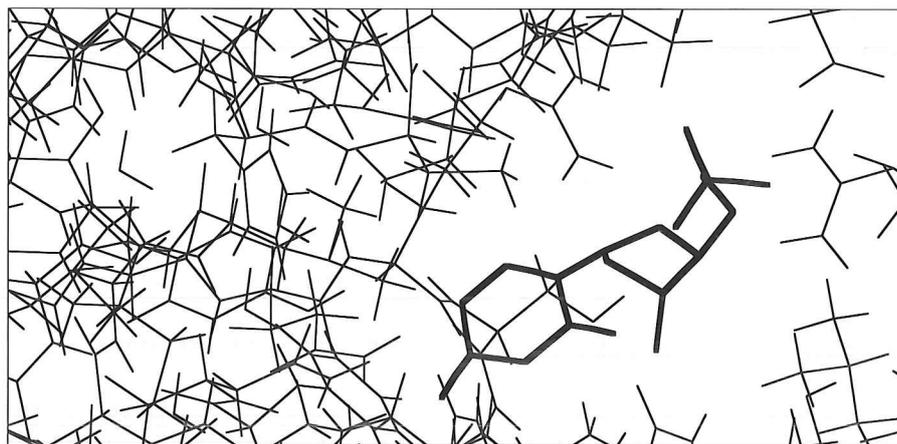
siendo una tarea prioritaria. Como la replicación viral depende principalmente de los procesos metabóli-

cos de la célula invadida, los agentes que puedan inhibir los procesos celulares e incluso destruir los virus, pueden dañar a su vez las células del huésped que los alberga. El desafío estriba en descubrir fármacos que inhiban los procesos específicos de un virus dado (tales como la unión, la pérdida de cobertura, la replicación o la síntesis macromolecular dirigida por el virus) sin dañar la célula humana.

Desde el año 1959, fecha del descubrimiento del primer nucleósido antiviral, 5'-iodo-2'-desoxiuridina, determinados derivados sintéticos de la 2'-desoxiuridina forman parte del arsenal de tratamientos para combatir enfermedades de tipo vírico y oncológico.

Así, la idoxuridina (IDU, 5'-iodo-2'-desoxiuridina), la edoxudina (EDU, 5-etil-2'-desoxiuridina) y la trifluridina (TFT, 5-trifluorometil-2'-desoxiuridina) se usan en el tratamiento tópico de la queratitis herpética. La brivudina (BVDU, (E)-5-(2-bromovinil)-2'-desoxiuridina) y su análogo iodado IVDU se aplican en el tratamiento de infecciones por virus herpes simplex tipo 1 (HSV-1), virus varicela-zoster (VZV) en pacientes inmunodeprimidos y en el tratamiento tópico de infecciones oculares herpéticas. La floxuridina (FDU, 5-fluoro-2'-desoxiuridina) se emplea habitualmente en el tratamiento de tumores de mama y del aparato digestivo y de otros tumores sólidos.

Enzimas como la timidina quinasa (TK), o la ADN polimerasa, ambas inducidas por el virus después de haber invadido la célula, así como la timidilato sintasa (TS), enzima clave en la síntesis de ADN, son los blancos más adecuados para estos agentes quimioterápicos derivados de la 2'-desoxiuridina. Con frecuencia, las enzimas codificadas por el virus difieren en ciertas propiedades de las codificadas por la célula, entre ellas la especificidad por el sustrato. Estas diferencias constituyen la base de la acción antiviral selectiva del nucleósido sintético.



*Estructura del complejo formado por la enzima timidilato sintasa y la fluorodesoxiuridina monofosfato.*

La investigación de los uracilos 5-sustituidos llevada a cabo en esta Tesis está motivada por el interés en desentrañar los mecanismos de acción de algunas enzimas, tales como la timidina quinasa y la timidilato sintasa, que interaccionan con los uracilos o con sus nucleósidos o nucleótidos, así como averiguar los factores responsables del modo y el grado de interacción entre sustratos y catalizador. En muchos casos, la naturaleza y la posición de los sustituyentes de una molécula sustrato pueden correlacionarse con el grado de interacción de éstas con las enzimas y también con su capacidad de actuar como sustratos o inhibidores en una reacción enzimática. El conocimiento de estos factores es requisito previo para el diseño de fármacos inhibidores más eficaces

Para interpretar adecuadamente los espectros de vibración y de RMN de los fármacos, y las alteraciones que se producen al interaccionar éstos con los receptores biológicos (aparición o desaparición de bandas, desplazamientos de frecuencia, variaciones de intensidad y de perfil) es necesario conseguir una asignación fiable de las bandas espectrales observadas. Más que el uso de frecuencias de grupo o correlaciones con series de compuestos análogos, hay que recurrir a planteamientos más rigurosos como el análisis de coordenadas normales y simulaciones espectrales.

De todos estos aspectos trata la Tesis Doctoral. En resumen, los

objetivos del trabajo que se presenta en esta Tesis Doctoral son:

1. Determinar y analizar las siguientes propiedades moleculares de los agentes antivirales derivados de la 2'-desoxiuridina: su distribución de carga, el momento dipolar, la reactividad, las conformaciones y los parámetros estructurales. También estudiar la posible relación de estas propiedades en la serie de compuestos con su actividad antiviral.
2. Obtener información sobre la estructura, la conformación y posibilidades de interacción de estas drogas con un modelo simplificado del receptor de la enzima timidilato sintasa mediante espectroscopía de vibración y de RMN.

Para alcanzar los objetivos anteriores se han utilizado métodos de cálculo mecanoclásicos y mecano cuánticos, que permiten determinar las propiedades eléctricas, estructurales y de reactividad de las moléculas. Asimismo se han aplicado técnicas espectroscópicas que proporcionan una abundante información estructural de los compuestos en fase sólida y en disolución acuosa, como la espectroscopía FT-IR, FT-Raman y de RMN.

La gran similitud estructural dentro de la serie de desoxiuridinas 5-sustituidas que muestran actividad antiherpética o antitumoral facilita la observación de relaciones entre

las propiedades moleculares (como son la distribución de carga, el momento dipolar, los conformeros, la reactividad, los parámetros estructurales) y la actividad antiviral.

Se han empleado las técnicas más actuales de espectroscopía 1D y 2D  $^1\text{H}$  RMN, de alta resolución, incluyendo el DPGFSE NOE y la espectroscopía  $^{13}\text{C}$  RMN. A partir de una simulación por ordenador de los espectros de protón, se han medido las constantes de acoplamiento ( $^3J_{\text{HH}}$ ) para su aplicación en el cálculo posterior de las conformaciones de las moléculas.

La expresión matemática de dicha correlación es la ecuación de Karplus, que en su forma más general viene dada por la modificación de Haasnoot [1]:

$$^3J_{\text{HH}} = P_1 \cos^2 \Phi_{\text{HH}} + P_2 \cos \Phi_{\text{HH}} + P_3 + \sum_{\text{T}}^4 \Delta\chi_{\text{i}} (P_4 + P_5 \cos^2 (\xi_{\text{i}} \Phi_{\text{HH}} + P_6 |\Delta\chi_{\text{i}}|)) + \Delta J \quad [1]$$

Los espectros  $^{13}\text{C}$  RMN de los nucleósidos y de sus complejos con la L-cisteína, modelo simplificado del sitio activo de la enzima timidi-

lato sintasa, proporcionan información sobre posibles interacciones en disolución acuosa.

Con los recientes avances en la terapia, es decir, el empleo de genes para transportar los precursores de los fármacos o "prodrogas" directamente a su lugar de acción en la célula tumoral o en el virus con el fin de activar el fármaco citotóxico solamente en los tejidos específicos a modo de "caballo de Troya", el estudio de los nucleósidos por los métodos fisicoquímicos empleados en este trabajo puede ser de gran utilidad en los campos de investigación biomédica.

## ACTIVIDADES CIENTÍFICAS

### Conferencia: "Conformación y dinámica de cadenas macromoleculares"

3 de noviembre de 1998

El Prof. Arturo Horta Zubiaga, Catedrático de Química-Física de la UNED, con motivo de la ceremonia oficial de su incorporación a la Academia Chilena de Ciencias como Miembro Correspondiente, impartió la conferencia más arriba indicada, cuyo resumen es el siguiente:

La comprensión de las relaciones entre estructura y propiedades es una de las metas más importantes de la investigación fisicoquímica de polímeros. Tradicionalmente se ha basado en estudios experimentales que requieren la síntesis de estructuras específicas y la preparación de materiales para ser sometidos a ensayos mecánicos, técnicos,... Sin embargo, con los recursos informáticos de los que se dispone hoy, se ha ido desarrollando un nuevo enfoque basado en el modelado y la simulación. Las simulaciones sirven



*Conferencia ofrecida por el Prof. Arturo Horta, el martes 3 de noviembre de 1998 en la sede de la Academia Chilena de Ciencias.*

para analizar la dinámica de cadena de polímeros sólo a tiempos cortos, pero eso basta para poder estudiar las transiciones conformacionales, la reorientación de enlaces, ...Afortunadamente, muchas de las propiedades dinámicas de los polímeros que se estudian mediante técnicas experimentales corrientes, tales como resonancia magnética nuclear, difusión de luz, relajamiento dieléct-

trico, ..., pueden atribuirse a dichos movimientos locales, y el resultado obtenido por simulación puede así compararse con los datos experimentales. En nuestro caso, la técnica experimental que hemos venido aplicando para el estudio de los polisiloxanos es la fluorescencia, tanto estática como dinámica. Una de las herramientas de análisis utilizadas es la Dinámica Molecular, que permite obtener la estadística de los isómeros de una manera realista, incluyendo todos los grados de libertad moleculares, en contraste con los métodos clásicos de la estadística conformacional que supone la rigidez de los enlaces. Con este enfoque hemos visto que la Dinámica Molecular predice bien el comportamiento experimental y permite, además, discernir cuál es el mecanismo del proceso observado en los espectros de emisión. Todo parece indicar que dicho proceso no viene determinado por la rotación de los enlaces troncales, lo cual está en contra de los modelos clásicos para los que el mecanismo cinético de formación de excímeros pasa por la rotación.