

DEPARTAMENTO DE QUÍMICA ORGÁNICA			
TEMA	TUTOR DEL PROYECTO	TUTOR ACADÉMICO	OBSERVACIONES
Nanosistemas NIR-fotoactivos estables en medios ácidos	Julia Pérez Prieto / María González Béjar	Julia Pérez Prieto / María González Béjar	CONCERTADO
Síntesis de ligandos orgánicos para la liberación fotoinducida de moléculas de interés utilizando nanosistemas	Julia Pérez Prieto / Raquel Eugenia Galián	Julia Pérez Prieto / Raquel Eugenia Galián	CONCERTADO
Degradación de compuestos orgánicos catalizada por MOFs (metal organic framework)	Julia Pérez Prieto / Raquel Eugenia Galián	Julia Pérez Prieto / Raquel Eugenia Galián	CONCERTADO
Síntesis y caracterización de nanopartículas de oro decoradas con un ligando orgánico	Julia Pérez Prieto / María Elena Zaballos García	Julia Pérez Prieto / María Elena Zaballos García	CONCERTADO
Catálisis asimétrica en reacciones de adición de carbaniones estabilizados funcionalizados a iminas	Gonzálo Blay Llinares	Gonzálo Blay Llinares	CONCERTADO
Catálisis asimétrica en reacciones de adición conjugada de carbaniones a iminas insaturadas	Gonzálo Blay Llinares	Gonzálo Blay Llinares	CONCERTADO
Preparación de poliaminas. Estudio de actividad antitumoral	Concepción Soriano Soto / José Miguel Llinares Berenguer	Concepción Soriano Soto / José Miguel Llinares Berenguer	CONCERTADO
Caracterización teórica de interacciones débiles por puentes de hidrógeno	Luis Ramón Domingo Asensi	Luis Ramón Domingo Asensi	LIBRE
Establecimiento de escalas de electrofilia y nucleofilia teóricas	María José Aurell Piquer	María José Aurell Piquer	LIBRE
Reacciones de alquilación enantioselectiva de derivados del 1,1-dióxido benzo[d]isotiazol-3-carboxilato de etilo	José Ramón Pedro Llinares / Carlos Vila Descals	José Ramón Pedro Llinares / Carlos Vila Descals	LIBRE
Reacciones de alquilación Friedel-Crafts de 6-Hidroxiquinoleína con cetiminas derivadas de la isatina	José Ramón Pedro Llinares / Carlos Vila Descals	José Ramón Pedro Llinares / Carlos Vila Descals	LIBRE
Síntesis de nuevos derivados difluorados benzofusionados mediante alilación asimétrica	Santos Fustero Lardiés / Amparo Asensio Martínez	Amparo Asensio Martínez	CONCERTADO
Estudio de la reacción de alilación catalítica enantioselectiva de compuestos carbonílicos fluorados	Santos Fustero Lardiés / Antonio Simón Fuentes	Antonio Simón Fuentes	CONCERTADO

TFG_QUIMICA_1516_QUÍMICA_ORGANICA_WEB

<u>TEMA</u>	<u>TUTOR DEL PROYECTO</u>	<u>TUTOR ACADÉMICO</u>	<u>OBSERVACIONES</u>
Síntesis total de alcaloides derivados de piperidina y pirrolidina	Santos Fustero Lardiés / Carlos del Pozo Losada	Carlos del Pozo Losada	CONCERTADO
Síntesis orgánica orientada a procesos de captura de CO ₂	Rossella Mello / María Elena González Núñez	Rossella Cecilia Mello Centonze / María Elena González Núñez	CONCERTADO
Síntesis de derivados de 1,2,3-triazoles condensados con anillos aromáticos. Potenciales aplicaciones en Química Supramolecular.	Rafael Ballesteros Garrido	Belén Abarca González	CONCERTADO
Ingeniería cristalina con ligandos de tipo tripodal	Carmen Ramírez de Arellano Sánchez / Emili Escrivá Montó	Carmen Ramírez de Arellano Sánchez / Emili Escrivá Montó	LIBRE
Síntesis enantioselectiva de metabolitos y análogos de la micotoxina anatoxina-a	Antonio Abad Somovilla / Antonio Abad Fuentes	Antonio Abad Somovilla	CONCERTADO
Síntesis de nuevos derivados y bioconjugados de la toxina patulina	Consuelo Agulló Blanes / Josep Vicent Mercader Badía	Consuelo Agulló Blanes	CONCERTADO
Desarrollo de sensores para la detección de neurotransmisores en medios biológicos	Margarita Parra Álvarez	Margarita Parra Álvarez	CONCERTADO
Diseño, síntesis y evaluación de sensores cromogénicos y/o fluorogénicos para la detección de gases contaminantes	Salvador Gil Grau Ana Costero Nieto	Salvador Gil Grau Ana Costero Nieto	CONCERTADO
Desarrollo de sistemas micrométricos mesoporosos para el transporte y liberación controlada de fármacos	Ana María Costero Nieto	Ana María Costero Nieto	CONCERTADO
Diseño y síntesis de compuestos potencialmente activos como antitumorales. I	Ana C. Cuñat Romero / Juan Francisco Sanz Cervera	Ana C. Cuñat Romero / Juan Francisco Sanz Cervera	CONCERTADO
Diseño y síntesis de compuestos potencialmente activos como antitumorales. II	Ana C. Cuñat Romero / Juan Francisco Sanz Cervera	Ana C. Cuñat Romero / Juan Francisco Sanz Cervera	CONCERTADO
Diseño y síntesis de compuestos potencialmente activos como antitumorales. III	Ana C. Cuñat Romero / Juan Francisco Sanz Cervera	Ana C. Cuñat Romero / Juan Francisco Sanz Cervera	LIBRE

TFG_QUIMICA_1516_QUÍMICA_ORGANICA_WEB

<u>TEMA</u>	<u>TUTOR DEL PROYECTO</u>	<u>TUTOR ACADÉMICO</u>	<u>OBSERVACIONES</u>
Diseño y síntesis de compuestos potencialmente activos como antitumorales. IV	Ana C. Cuñat Romero / Juan Francisco Sanz Cervera	Ana C. Cuñat Romero / Juan Francisco Sanz Cervera	CONCERTADO
Estudio de la relación actividad-estructura de los p-terfenilos miméticos de la proteína Rev	Santos Fustero Lardiés	Santos Fustero Lardiés / Antonio Simón Fuentes	CONCERTADO
Desarrollo y validación de un inmunoensayo para la determinación de residuos del fungicida fluxapyroxad en alimentos	Consuelo Agulló Blanes / Josep Vicent Mercader Badia	Consuelo Agulló Blanes	CONCERTADO
New method for the desoxygenation of compounds in alfa-position of a carbonyl with PPh ₃ /I ₂ /Pyridine	Phillipe Compain	José Ramón Pedro Llinares	CONCERTADO
Acción enantioselectiva de bromomalonato a iminas insaturadas	M ^a Luz Cardona Prósper	M ^a Luz Cardona Prósper	LIBRE
Preparación de catalizadores de tipo homoescorpionato a partir de pirazoles sintetizados por metodologías avanzadas	Gregorio Asensio Aguilar / Mercedes Medio Simón	Gregorio Asensio Aguilar / Mercedes Medio Simón	LIBRE
Síntesis de índoles y compuestos relacionados mediante reacciones en cascada catalizadas por complejos de materiales de transición	Gregorio Asensio Aguilar	Gregorio Asensio Aguilar	CONCERTADO

**TEMA TRABAJO FIN DE GRADO
GRADO EN QUIMICA**

Curs acadèmic 2015-2016

TUTOR DEL PROYECTO: Carmen Ramírez de Arellano Sánchez (Química Orgánica) y Emili Escrivá

Monto (Química Inorgánica)

TUTOR ACADÉMICO: Carmen Ramírez de Arellano Sánchez (Química Orgánica) y Emili Escrivá

Monto (Química Inorgánica)

TITULO PROVISIONAL

Ingeniería cristalina con ligandos de tipo tripodal

OBJETIVOS

- Sintetizar y cristalizar compuestos de coordinación con propiedades magnéticas.
- Determinar la estructura por difracción de rayos X y estudiar las interacciones y el empaquetamiento cristalino
- Relacionar las propiedades magnéticas con la estructura encontrada.

METODOLOGÍA

- Iniciación teórico/práctica a los procesos de síntesis y cristalización de compuestos de coordinación.
- Introducción teórico/práctica a la determinación estructural utilizando la difracción de rayos X de monocristal, lo que incluye: aislamiento y tratamiento de cristales, manejo del difractor, uso de programas informáticos para el tratamiento de datos, estudios de interacciones y de ensamblajes moleculares.
- Introducción práctica al uso de herramientas informáticas para la realización de búsquedas parametrizadas en la base de datos cristalográficos de Cambridge y al análisis de estos.
- Iniciación teórico/práctica al estudio y determinación de los posibles caminos de intercambio magnético

(segell del Departament)

**TEMA TRABAJO FIN DE GRADO
GRADO EN QUIMICA**

Curs acadèmic 2015-2016

TUTOR DEL PROYECTO: Ana M. Costero

TUTOR ACADÉMICO: Ana M. Costero

TITULO PROVISIONAL

Desarrollo de sistemas micrométricos mesoporosos para el transporte y liberación controlada de fármacos

OBJETIVOS

- Diseño y síntesis de puertas moleculares para el desarrollo de sistemas híbridos.
- Evaluación de los distintos estímulos que determinan la situación (abierta o cerrada) en la que se encuentra la puerta.
- Evaluación de la capacidad como puerta molecular del sistema sintetizado.

METODOLOGÍA

Una vez diseñada la puerta molecular adecuada, basada en la experiencia del grupo de investigación y en la bibliografía más reciente, se pasará a su síntesis, basándose en los conocimientos y experiencia en química orgánica. Nos hemos planteado la síntesis de puertas moleculares que pueden ser abiertas (mediante ruptura química) por la acción de estearasas. La puerta molecular debe ser obtenida, purificada y caracterizada haciendo uso de todas las técnicas cromatográficas y espectroscópicas que están a disposición del grupo de investigación. Una vez caracterizada se anclará al sistema microporoso que también deberá ser caracterizado. Se evaluará la capacidad como puerta cargando los poros del sistema con algún colorante y evaluando las condiciones de ruptura y liberación enzimática.

(segell del Departament)

**TEMA TRABAJO FIN DE GRADO
GRADO EN QUIMICA**

Curso académico 2015-2016

TUTOR DEL PROYECTO: Antonio Abad Somovilla/Antonio Abad Fuentes

TUTOR ACADÉMICO: Antonio Abad Somovilla

TITULO PROVISIONAL

Síntesis enantioselectiva de metabolitos y análogos de la micotoxina anatoxina-a

OBJETIVOS

El presente proyecto tiene como objetivo la síntesis enantioselectiva de análogos y metabolitos de la anatoxina-a, una micotoxina producida por algunas algas verdes en aguas dulces y también conocida como "el factor de muerte rápida". Se trata de una de las neurotoxinas más potentes que se conocen por lo que su presencia en aguas está regulado por diferentes normativas.

En concreto, en este proyecto se llevará a cabo la preparación de la homoanatoxina-a, un derivado metilado de la anatoxina-a, y los dos metabolitos más importantes de esta, la epoxianatoxina-a y la dihidroanatoxina-a para ser utilizados como patrones en la estandarización de procedimientos analíticos de la micotoxina.

METODOLOGÍA

- a) Búsqueda bibliográfica dirigida.
- b) Lectura y análisis de la bibliografía más relevante.
- c) Análisis de la metodología sintética más adecuada para alcanzar el objetivo.
- d) Desarrollo de la secuencia sintética utilizando diferentes técnicas sintéticas, que incluirán entre otros:
 - i) Desarrollo de reacciones a temperatura variable (-78°C hasta +200°C) utilizando métodos convencionales y/o horno de microondas, irradiación de ultrasonidos, etc.
 - ii) Trabajo en atmosfera inerte.
 - iii) Seguimiento de la reacción por métodos cromatográficos (CCF, CG y/o HPLC analítico, etc)
 - iv) Procesado de reacción.
 - v) Purificación de productos por técnicas cromatográficas (CC, HPLC preparativo, etc).
 - v) Identificación estructural de intermedios y productos finales por técnicas espectroscópicas, fundamentalmente IR, RMN de ^1H y ^{13}C mono y bidimensional, EM de baja y alta resolución, etc.
- e) Discusión de los resultados alcanzados.
- g) Elaboración de la memoria y preparación de una presentación pública.

**TEMA TRABAJO FIN DE GRADO
GRADO EN QUIMICA**

Curso académico 2015-2016

TUTOR DEL PROYECTO: Consuelo Agulló Blanes y Josep Vicent Mercader Badía

TUTOR ACADÉMICO: Consuelo Agulló Blanes

TITULO PROVISIONAL

Síntesis de nuevos derivados y bioconjugados de la toxina patulina

OBJETIVOS

La patulina es una toxina producida por mohos muy diferentes y que puede estar presente en determinados alimentos. Tiene efectos muy adversos para la salud humana, por lo cual la OMS y la FAO han establecido conjuntamente una regulación muy estricta para su presencia en alimentos (0,4 mg/Kg). El presente proyecto tiene como objetivo la síntesis de nuevos derivados de patulina y bioconjugados de los mismos que se utilizarán para el desarrollo de nuevos procedimientos analíticos basados en técnicas inmunoquímicas.

METODOLOGÍA

- a) Búsqueda bibliográfica dirigida.
- b) Lectura y análisis de la bibliografía más relevante.
- c) Análisis de la metodología sintética más adecuada para alcanzar el objetivo.
- d) Desarrollo de la secuencia sintética utilizando diferentes técnicas sintéticas, que incluirán entre otros:
 - i) Desarrollo de reacciones a temperatura variable (-78°C hasta +200°C) utilizando métodos convencionales y/o horno de microondas, irradiación de ultrasonidos, etc.
 - ii) Trabajo en atmósfera inerte.
 - iii) Seguimiento de la reacción por métodos cromatográficos (CCF, CG y/o HPLC analítico, etc)
 - iv) Procesado de reacción.
 - v) Purificación de productos por técnicas cromatográficas (CC, HPLC preparativo, etc).
 - v) Identificación estructural de intermedios y productos finales por técnicas espectroscópicas, fundamentalmente IR, RMN de ^1H y ^{13}C mono y bidimensional, EM de baja y alta resolución, , etc.
- e) Preparación de bioconjugados, purificación por cromatografía de exclusión molecular y caracterización por MALDI-TOF.
- f) Discusión de los resultados alcanzados.
- g) Elaboración de la memoria y preparación de una presentación pública.

**TEMA TRABAJO FIN DE GRADO
GRADO EN QUIMICA**

Curs acadèmic 2015-2016

TUTOR DEL PROYECTO: Margarita Parra Alvarez

TUTOR ACADÉMICO: Margarita Parra Alvarez

TITULO PROVISIONAL

Desarrollo de sensores para la detección de neurotransmisores en medios biológicos

OBJETIVOS

- Diseño y síntesis de dosímetros para la detección de neurotransmisores.
- Evaluación de la respuesta sensora en distintos medios.
- Aplicación en células.

METODOLOGÍA

Una vez diseñado el quimiosensor adecuado, basado en la experiencia del grupo de investigación y en la bibliografía más reciente, se pasará a su síntesis, basándose en los conocimientos y experiencia en química orgánica.

El quimiosensor debe ser obtenido, purificado y caracterizado haciendo uso de todas las técnicas cromatográficas y espectroscópicas que están a disposición del grupo de investigación.

Una vez caracterizado se evaluará su capacidad sensora mediante técnicas de espectroscopía UV-Vis y/o fluorescencia, al preparar complejos supramoleculares con el gas adecuado. Se determinarán los límites de detección y los posibles interferentes.

(segell del Departament)

**TEMA TRABAJO FIN DE GRADO
GRADO EN QUIMICA**

TUTOR DEL PROYECTO: Salvador Gil Grau

TUTOR ACADÉMICO Salvador Gil Grau

TITULO PROVISIONAL

Diseño, síntesis y evaluación de sensores cromogénicos y/o fluorogénicos para la detección de gases contaminantes

OBJETIVOS

- Diseño y síntesis de quimiosensores para la detección de gases peligrosos (óxidos de nitrógeno, ácido cianhídrico, formaldehído, etc.)
- Evaluación de su capacidad sensora

METODOLOGÍA

Una vez diseñado el quimiosensor adecuado, basado en la experiencia del grupo de investigación y en la bibliografía más reciente, se pasará a su síntesis, basándose en los conocimientos y experiencia en química orgánica.

El quimiosensor debe ser obtenido, purificado y caracterizado haciendo uso de todas las técnicas cromatográficas y espectroscópicas que están a disposición del grupo de investigación.

Una vez caracterizado se evaluará su capacidad sensora mediante técnicas de espectroscopía UV-Vis y/o fluorescencia, al preparar complejos supramoleculares con el gas adecuado. Se determinarán los límites de detección y los posibles interferentes.

Si es posible se anclará dicho sensor a un soporte sólido, tipo MCM-41 o nanopartículas de Au, para poder evaluar la mejora en la estrategia desarrollada.

TEMA TRABAJO FIN DE GRADO

GRADO EN QUIMICA

Curs acadèmic 2015-2016

TUTOR DEL PROJECTE: Santos Fustero Lardiés, Amparo Asensio Martínez

TUTOR ACADÈMIC: Amparo Asensio Martínez

TÍTOL PROVISIONAL:

Síntesis de nuevos derivados difluorados benzofusionados mediante alilación asimétrica.

OBJETIUS:

Desarrollo de procedimientos adecuados para la preparación de diversas estructuras cíclicas difluoradas enantioméricamente puras, donde participen reacciones como la alilación diastereoselectiva, metátesis con cierre de anillo, cambios de grupos protectores. Todo ello mediante la preparación previa de los sustratos de partida convenientemente funcionalizados.

METODOLOGIA

La metodología utilizada para llevar a cabo este trabajo englobará diferentes técnicas y procedimientos. En primer lugar, y tras una primera búsqueda bibliográfica, se procederá al estudio de la mejor ruta sintética a seguir para alcanzar los objetivos. Esta ruta recogerá la síntesis de los intermedios necesarios a partir sustratos comercialmente disponibles. Así, mediante alilación diastereoselectiva y metátesis con cierre de anillo (RCM) como etapas clave del proceso, se prepararán diversos compuestos análogos bicíclicos fluorados marcados como objetivo.



Todo esto permitirá al alumno familiarizarse con las técnicas de síntesis orgánica, así como con las técnicas de purificación (cromatografía en capa fina y columna) y análisis estructural e instrumental (RMN, HPLC, GC-MS, etc). Finalmente, los resultados obtenidos permitirán elaborar una memoria escrita del trabajo realizado.

TEMA TRABAJO FIN DE GRADO

GRADO EN QUIMICA

Curs acadèmic 2015-2016

TUTOR DEL PROJECTE: Santos Fustero Lardiés, Antonio Simón Fuentes

TUTOR ACADÈMIC: Antonio Simón Fuentes

TÍTOL PROVISIONAL

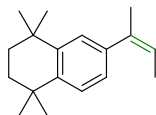
Estudio de la reacción de alilación catalítica enantioselectiva de compuestos carbonílicos fluorados.

OBJETIUS

El principal objetivo para este trabajo es la preparación de derivados de alcoholes homoalílicos cíclicos benzofusionados fluorados, análogos a los no fluorados preparados anteriormente por nuestro grupo de investigación. Para ello, se llevará a cabo una secuencia sintética alilación enantioselectiva/RCM inicialmente en un proceso por pasos, para luego estudiar la posibilidad de llevarlo a cabo de forma tándem.

METODOLOGIA

De entre todas las moléculas orgánicas, las fluoroolefinas son de gran interés y su estudio ha sido particularmente importante en la síntesis de peptidomiméticos o ciencia de los materiales por poder modificar las propiedades físicas.¹ Además las fluoroolefinas están presentes en compuestos bioactivos tales como anti-diabéticos o anti-VIH.²



Por otro lado, los fluoroalquenos permiten mimetizar la polaridad del grupo amida mejorando algunas de sus propiedades biofísicas.³ Por tanto, estrategias de incorporación de un fluoroalqueno en pruebas biológicas permiten incrementar la lipofilia y la permeabilidad en la membrana celular siendo más difícil su hidrólisis por la acción de proteasas y dando una mayor estabilidad al péptido.⁴

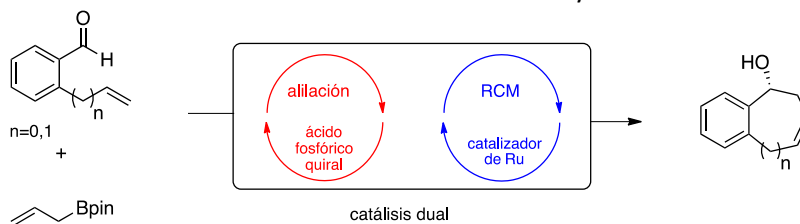
¹ G. Landelle, M. Bergeron, M.-O. Turcotte-Savard, J.-F. Paquin *Chem. Soc. Rev.*, **2011**, 40, 2867.

² G. Lemonnier, N. V. Hijfte, M. Sebban, T. Poisson. *Tetrahedron*, **2014**, 70, 3123.

³ R. J. Abraham, S. L. R. Ellison, P. Schonholzer, W. A. Thomas. *Tetrahedron*, **1986**, 42, 2101.

⁴ M. H. Yang, S. S. Matikonda, R. A. Altamn. *Org. Lett.*, **2013**, 15, 3894.

Por otro lado, la alilación enantioselectiva de compuestos carbonílicos se puede llevar a cabo de forma eficaz mediante el empleo de ácidos binol-fosfóricos quirales como catalizadores.⁵ Hasta el momento, se ha llevado a cabo por nuestro grupo de investigación una secuencia *tándem* de reacción alilación enantioselectiva/metátesis por cierre de anillo (*RCM*) a partir de *orto*-vinilbenzaldehídos para dar alcoholes homoalílicos cíclicos benzofusionados con excelentes rendimientos y excesos enantioméricos.⁶



En el presente proyecto se han de evaluar la síntesis de análogos a los ya sintetizados pero en este caso fluorados. Para ello se usará como sustratos de partida los generados a partir de reactivos de fluoración nucleofílica y NBS ó NIS de *orto*-vinilbenzaldehídos.⁷ Posteriormente se evaluará la secuencia sintética alilación enantioselectiva/*RCM* inicialmente en un proceso por pasos, para luego estudiar la posibilidad de llevarlo a cabo de forma *tándem*.



La ausencia de precedentes de síntesis de *orto*-vinilbenzaldehídos fluorados en la literatura hace de este proyecto un gran reto tanto en el campo de la *relay* catálisis como en la síntesis de los compuestos finales.

⁵ P. Jain, J. C. Antilla, *J. Am. Chem. Soc.* **2010**, *132*, 11884.

⁶ S. Fustero, E. Rodríguez, R. Lázaro, L. Herrera, S. Catalán, P. Barrio, *Adv. Synth. Catal.* **2013**, *355*, 1058.

⁷ Para la síntesis del sustrato de partida véase Tesis Rubén Lázaro.

**TEMA TRABAJO FIN DE GRADO
GRADO EN QUIMICA**

TUTOR DEL PROYECTO: Santos Fustero Lardiés, Carlos del Pozo Losada

TUTOR ACADÉMICO: Carlos del Pozo Losada

TITULO PROVISIONAL

Síntesis total de alcaloides derivados de piperidina y pirrolidina

OBJETIVOS

El objetivo principal de este proyecto es la aplicación de la reacción aza-Michael intramolecular asimétrica a procesos de desimetrización. Específicamente se abordará la síntesis de dos alcaloides derivados de piperidina.

METODOLOGÍA

Recientemente en nuestro grupo de investigación hemos desarrollado una metodología que nos permite llevar a cabo procesos de desimetrización mediante la reacción aza-Michael intramolecular. Se han implementado dos variantes, una organocatalítica y otra empleando sulfóxidos quirales como auxiliares. En este proyecto nos proponemos emplear esta metodología para la preparación de dos alcaloides piperidínicos; la anaferina y la cuscohigrina.

TEMA TREBALL FI DE GRAU

GRAU EN QUÍMICA

Curs acadèmic 2015-16

TUTOR DEL PROJECTE: Rafael Ballesteros Garrido

TUTOR ACADÈMIC: Belén Abarca González

TÍTOL PROVISIONAL: Síntesis de derivados de 1,2,3-triazoles condensados con anillos aromáticos. Potenciales aplicaciones en Química Supramolecular.

OBJETIUS: Los 1,2,3-triazoles condensados son compuestos que pueden formar interesantes productos de coordinación con propiedades ópticas y magnéticas de aplicación en química supramolecular. En nuestro grupo se han estudiado distintas 1,2,3-triazolopiridinas, compuestos fluorescentes que actúan como sensores de aniones y de cationes.

Los objetivos de este proyecto son sintetizar nuevos derivados de triazolopiridinas, estudiar su capacidad de coordinación con distintos metales y sus propiedades ópticas o magnéticas con potencial aplicación en química supramolecular.

Para desarrollar estos objetivos se utilizará la metodología desarrollada por nuestro grupo.^{1,2}

METODOLOGIA: 1.- Se sintetizarán los productos de partida, triazolopiridinas 3-sustituidas **1**, a partir del 2-piridil carboxaldehído o de la 2-piridil cetona correspondiente, por tratamiento con hidrazina y posterior oxidación con óxido de manganeso de la hidrazona formada.¹

2.- Se llevarán a cabo reacciones de litiación regioselectiva y posterior reacción con distintos electrófilos (E) para dar lugar a nuevos derivados 7-sustituidos **2**.¹

3.- Se estudiará la coordinación de los compuestos **2** y sus propiedades como sensores fluorescentes.²

[1].- **a)** B. Abarca, R. Ballesteros, M. Elmasnaouy, *Tetrahedron* **1998**, *54*, 15287. **b)** B. Abarca, R. Ballesteros, M. Chadlaoui, *Tetrahedron*, **2004**, *60*, 578. **c)** B. Abarca, R. Adam, R. Ballesteros, L. Chiassai, C. Gamón, *Arkivoc*, **2012**, *ix*, 229.

[2].- **a)** C. Jullian, S. Frenández-Sandoval, M. Rojas-Araguiz, H. Gómez Machuca, P. Salgado-Figueroa, C. Celis-Barros, G. Zapata, R. Adam, B. Abarca, *Carbohydrate Polymers*, **2014**, *107*, 124. **b)** R. Ballesteros-Garrido, B. Abarca, R. Ballesteros, C. Ramírez de Arellano, FR. Leroux, F. Colobert, E. García-España E, *New Journal of Chemistry*, **2009**, *33*, 2102. **c)** B. Abarca, R. Ballesteros, M. Chadlaoui, C. Ramírez de Arellano, *JA Real, Eur. J. Inorg. Chem.*, **2007**, 4574. **d)** M. Chadlaoui, B. Abarca, R. Ballesteros, C. Ramírez de Arellano, J. Aguilar, R. Aucejo, E. García-España, *J. Org. Chem.*, **2006**, *71*, 9030.

(segell del Departament)

**TEMA TRABAJO FIN DE GRADO
GRADO EN QUIMICA**

Curs acadèmic 2015-2016

TUTOR DEL PROYECTO: GONZALO BLAY LLINARES

TUTOR ACADÉMICO: GONZALO BLAY LLINARES

TITULO PROVISIONAL

Catálisis asimétrica en reacciones de adición conjugada de carbaniones estabilizados a iminas insaturadas.

OBJETIVOS

- Desarrollo de metodologías sintéticas enantioselectivas basadas en el uso de catalizadores quirales (complejos metálicos y organocatalizadores).
- Síntesis de nuevos compuestos quirales mediante adición enantioselectiva de diferentes nucleófilos a iminas insaturadas.
- Modificación funcional de los productos obtenidos para sintetizar aminas quirales y otros compuestos nitrogenados con actividad biológica y farmacológica potencial.

METODOLOGÍA

- La metodología se basa en el uso de catalizadores quirales, constituidos tanto por complejos metálicos como organocatalizadores.

Se utilizará una reacción modelo para llevar a cabo la optimización de las condiciones de reacción ensayando diversos catalizadores, disolventes, aditivos, temperaturas, etc. Una vez establecidas las condiciones óptimas se estudiará el alcance de la reacción con diferentes sustratos. Finalmente se estudiarán modificaciones funcionales de los productos enriquecidos enantioméricamente para su conversión en compuestos de valor añadido.

El alumno debería adquirir competencias en los siguientes aspectos:

- Búsqueda bibliográfica.
- Técnicas de síntesis orgánica.
- Técnicas cromatográficas (cromatografía de capa fina y de columna)
- Análisis estructural (RMN, EM, etc.)
- Análisis instrumental (HPLC, CG, etc.)

**TEMA TRABAJO FIN DE GRADO
GRADO EN QUIMICA**

Curs acadèmic 2015-2016

TUTOR DEL PROYECTO: GONZALO BLAY LLINARES

TUTOR ACADÉMICO: GONZALO BLAY LLINARES

TITULO PROVISIONAL

Catálisis asimétrica en reacciones de adición de carbaniones estabilizados funcionalizados a iminas

OBJETIVOS

- Desarrollo de metodologías sintéticas enantioselectivas basadas en el uso de catalizadores quirales (complejos metálicos y organocatalizadores).
- Síntesis de nuevos compuestos quirales mediante adición enantioselectiva de diferentes nucleófilos a cetiminas.
- Modificación funcional de los productos obtenidos para sintetizar compuestos heterocíclicos quirales con actividad biológica y farmacológica potencial.

METODOLOGÍA

- La metodología se basa en el uso de catalizadores quirales, constituidos tanto por complejos metálicos como organocatalizadores.

Se utilizará una reacción modelo para llevar a cabo la optimización de las condiciones de reacción ensayando diversos catalizadores, disolventes, aditivos, temperaturas, etc. Una vez establecidas las condiciones óptimas se estudiará el alcance de la reacción con diferentes sustratos. Finalmente se estudiarán modificaciones funcionales de los productos enriquecidos enantioméricamente para su conversión en compuestos de valor añadido.

El alumno debería adquirir competencias en los siguientes aspectos:

- Búsqueda bibliográfica.
- Técnicas de síntesis orgánica.
- Técnicas cromatográficas (cromatografía de capa fina y de columna)
- Análisis estructural (RMN, EM, etc.)
- Análisis instrumental (HPLC, CG, etc.)

**TEMA TREBALL FI DE GRAU
GRAU EN QUÍMICA**

Curs acadèmic 2015-2016

TUTOR DEL PROJECTE: Rossella Mello y María Elena González Núñez

TUTOR ACADÈMIC: Rossella Mello y María Elena González Núñez

TÍTOL PROVISIONAL

Síntesis orgánica orientada a procesos de captura de CO₂

OBJETIUS

Los objetivos de los trabajos fin de grado se enmarcan en un proyecto más amplio dirigido a establecer los fundamentos y viabilidad de estrategias para el diseño de procesos sintéticos eficientes que incorporen CO₂ en productos orgánicos de interés, un objetivo de gran interés en los contextos de utilización de materias primas renovables, captura de CO₂ y mejora del impacto medioambiental de los procesos por sustitución de reactivos alternativos nocivos para el medioambiente. Los objetivos concretos del trabajo son la preparación de reactivos, productos, y/o catalizadores relacionados con procesos de captura de CO₂ y su eventual aplicación en este tipo de reacciones, que se establecerán de acuerdo con el desarrollo del proyecto general en el momento de la incorporación del estudiante.

METODOLOGIA

El trabajo supondrá la aplicación de técnicas experimentales y de determinación estructural comunes en Química Orgánica, dependiendo de los objetivos concretos que se planteen en el momento de la incorporación: trabajo en atmósfera inerte, aislamiento y purificación de reactivos, disolventes y productos, y caracterización de productos mediante técnicas espectroscópicas. Eventualmente el trabajo puede requerir la realización de experimentos en condiciones de alta presión, lo que implicará una introducción al equipamiento utilizado en estos casos, su manejo, y las características del diseño de experimentos en estas condiciones.

(segell del Departament)

**TEMA TREBALL FI DE GRAU
GRAU EN QUÍMICA**

Curs Acadèmic: 2015-2016

TUTOR DEL PROJECTE: José R. Pedro Llinares/Carlos Vila Descals

TUTOR ACADÈMIC: José R. Pedro Llinares/ Carlos Vila Descals

TÍTOL PROVISIONAL

Reacciones de alquilación Friedel-Crafts de 6-Hidroxiquinoleina con cetiminas derivadas de la isatina

OBJETIUS

Es bien conocida la importancia de la quiralidad de las moléculas orgánicas en distintas áreas, que abarcan desde la Biología a la Ciencia de Materiales. En un principio la quiralidad molecular podía parecer una curiosidad química, sin importancia o trascendencia más allá del interés puramente científico. Sin embargo, la tragedia de la talidomida puso de manifiesto, de una manera cruel, la importancia de la quiralidad en las moléculas orgánicas con actividad farmacológica. También en el campo de la Ciencia de Materiales se conoce que las propiedades que exhiben los materiales ópticos y electrónicos dependen de conjuntos moleculares altamente ordenados y que, en muchos casos, esta ordenación depende de la quiralidad.

Así, el desarrollo de nuevos métodos de síntesis enantioselectiva¹ constituye en la actualidad un área de intensa investigación. Entre ellos, los procedimientos catalíticos (catálisis asimétrica) resultan especialmente atractivos ya que permiten minimizar el consumo de quiralidad y disminuir la producción de residuos.²

En este contexto las reacciones de sustitución aromática electrofílica utilizando iminas como electrófilos constituyen métodos sintéticos de enorme importancia ya que las aminas quirales resultantes presentan estructuras altamente funcionalizadas de gran valor en la síntesis de una amplia variedad de productos naturales y farmacéuticos. Además las estructuras de oxindol o quinoleina están presentes en numerosos productos con actividades biológicas o farmacológicas.

Así en este proyecto se plantea como objetivo el estudio de las reacciones de Friedel-Crafts de 6-Hidroxiquinoleina con cetiminas derivadas de la isatina utilizando organocatalizadores derivados de alcaloides de la *Cinchona*.

METODOLOGIA

Se seguirá una metodología similar a la utilizada por nuestro grupo de investigación en otras reacciones enantioselectivas de sustitución aromática electrofílica.³ En concreto se llevará a cabo:

- 1) Preparación de diferentes cetiminas derivadas de la isatina.
- 2) Identificación de las condiciones óptimas de reacción, en lo que hace referencia al rendimiento de la reacción y, en especial, a la enantioselectividad, utilizando distintos organocatalizadores. Se utilizará como nucleófilo el 6-hidroxiquinolina y como electrófilo la cetimina derivada de la *N*-bencilisatina.
- 3) Estudio del alcance y limitaciones de la reacción, utilizando distintos derivados del 6-hidroxiquinoleína y diferentes cetiminas derivadas de la isatina.

BIBLIOGRAFIA

1. a) *New Frontiers in Asymmetric Catalysis*, K. Mikami, M. Lautens Eds., Wiley: New Jersey, 2007; b) *Enantioselective organocatalysis*. Dalko, P. I. Ed.; Wiley-VCH: Weinheim, 2007; c) *Asymmetric Organocatalysis*. Berkessel, A.; Gröger, H.; Wiley-VCH, Weinheim, 2005.
2. *Green Chemistry. Frontiers in Benign Chemical Synthesis and Processes*, P-T. Anastas, T.C. Williamson Eds., Oxford University Press: Oxford, 1998.
3. M. Montesinos-Magraner, C. Vila, R. Cantón, G. Blay, I. Fernández, M. Carmen Muñoz, J. R. Pedro, *Angew. Chem. Int. Ed.* 2015, 54, 6320–6324.

(segell del Departament)

**TEMA TREBALL FI DE GRAU
GRAU EN QUÍMICA**

Curs acadèmic 2015-2016

TUTOR DEL PROJECTE: Concepción Soriano Soto y José Miguel Llinares Berenguer

TUTOR ACADÈMIC:

TÍTOL PROVISIONAL: PREPARACIÓN DE POLIAMINAS. ESTUDIO DE ACTIVIDAD ANTITUMORAL.

OBJETIUS

- ✓ Síntesis y purificación de nuevos compuestos poliamínicos.
- ✓ Caracterización de estos compuestos empleando técnicas habituales en un laboratorio de química orgánica como son: ^1H RMN, ^{13}C RMN, COSY, HSQC, HMBC, etc...
- ✓ Estudio de su actividad antitumoral por parte de un grupo colaborador dentro del Programa CONSOLIDER donde se encuentra este proyecto.
- ✓ Estudio de las propiedades ácido/base de los compuestos así como de interacción con especies aniónicas, catiónicas y moléculas neutras.
- ✓ Estudio de la interacción de los compuestos sintetizados con el ADN.

METODOLOGIA

- 1.- Síntesis y purificación de nuevos compuestos poliamínicos.
- 2.- Caracterización de estos compuestos empleando técnicas habituales en un laboratorio de química orgánica como son: ^1H RMN, ^{13}C RMN, COSY, HSQC, HMBC, etc...
- 3.- Estudio de su actividad antitumoral.
- 4.- Mientras se esperan los resultados estudiaremos, siempre que sea posible, sus propiedades ácido-base e interacción con metales que son importantes en procesos apoptóticos.
- 5.- Una vez obtenidos los resultados de actividad antitumoral, estudiaremos su interacción con ADN.

**TEMA TREBALL FI DE GRAU
GRAU EN QUÍMICA**

Curs acadèmic 2015-2016

TUTOR DEL PROJECTE: Julia Perez Prieto/ M^a Elena Zaballos García

TUTOR ACADÈMIC: Julia Perez Prieto/ M^a Elena Zaballos García

TÍTOL PROVISIONAL

Síntesis y caracterización denanopartículas de oro decoradas con un ligando orgánico

OBJETIUS

Síntesis de nanopartículas de oro decoradas con ligandos orgánicos. Estudio de sus propiedades fotofísicas y su posible aplicación como sensores de contaminantes emergentes

METODOLOGIA

Se utilizarán diferentes estrategias para la síntesis de nanopartículas de oro a partir de sales de oro y un ligando orgánico. Una vez obtenidas se caracterizarán por diferentes técnicas UV-Vis, fluorimetría, TEM, etc. Se estudiará su estabilidad en diferentes disolventes, frente a la tiempo, la presencia de luz, así como su versatilidad en la detección de analitos etc

segell del Departament)

**TEMA TREBALL FI DE GRAU
GRAU EN QUÍMICA**

Curs acadèmic 2015-2016

TUTOR DEL PROJECTE: Julia Perez Prieto/Raquel Eugenia Galian

TUTOR ACADÈMIC: Julia Perez Prieto/Raquel Eugenia Galian

TÍTOL PROVISIONAL

- Degradación de compuestos orgánicos catalizada por MOFs (metal organic framework)

OBJETIUS

Estudiar la degradación de contaminantes modelo utilizando MOFs funcionalizados o no con sistemas fotoactivos.

METODOLOGIA

Para estos estudios se utilizarán MOFs ya reportados en la bibliografía, así como otros que serán funcionalizados con sistemas fotoactivos, utilizando estrategias de obtención de materiales híbridos. Dichos sistemas serán caracterizados por IR, espectroscopia de absorción/emisión, microscopia, entre otras técnicas.

Se estudiará la degradación de contaminantes modelo, siguiendo la transformación de los mismos por RMN, espectroscopia de absorción, y espectrometría de GC/Masas .

segell del Departament)

**TEMA TREBALL FI DE GRAU
GRAU EN QUÍMICA**

Curs acadèmic 2015-2016

TUTOR DEL PROJECTE: Julia Perez Prieto/Raquel Eugenia Galian

TUTOR ACADÈMIC: Julia Perez Prieto/Raquel Eugenia Galian

TÍTOL PROVISIONAL

Síntesis de ligandos orgánicos para la liberación fotoinducida de moléculas de interés utilizando nanosistemas

OBJETIUS

Sintetizar ligandos funcionalizados con moléculas de interés. Derivatizar nanoparticulas con dichos ligandos.
Estudiar la liberación fotoinducida de moléculas de interés.

METODOLOGIA

Se utilizarán estrategias de síntesis de moléculas orgánicas y los ligandos se caracterizarán por espectroscopia RMN eIR, así como espectrometría de GC/Masas.
Posteriormente, se realizará el intercambio de ligandos sobre nanoparticulas y los sistemas serán caracterizados por RMN, IR, microscopia, espectroscopia de absorción, entre otras técnicas. Se estudiara la respuesta del sistema a la irradiación utilizando técnicas mencionadas anteriormente.

segell del Departament)

**TEMA TREBALL FI DE GRAU
GRAU EN QUÍMICA**

Curs acadèmic 2015-2016

TUTOR DEL PROJECTE: Julia Pérez Prieto/Maria González Béjar

TUTOR ACADÈMIC: Julia Pérez Prieto/Maria González Béjar

TÍTOL PROVISIONAL

Nanosistemas NIR-fotoactivos estables en medios ácidos

OBJETIUS

Sintetizar nanosistemas formados con nanoparticulas que absorben luz infrarroja y emiten en el visible recubiertas con ligandos que proveen al sistema con estabilidad en medios considerablemente ácidos. Además el ligando permitiría la funcionalización del sistema con colorantes.

METODOLOGIA

Se sintetizarán nanoparticulas de upconversion utilizando métodos utilizados en el grupo de investigación. Se prepararán ligandos ácidos y se realizará el intercambio de ligandos sobre la nanopartícula de upconversion. El sistema será caracterizado utilizando las técnicas de RMN, IR, microscopia electrónica, entre otras. Se estudiará la estabilidad del sistema al medio ácido utilizando medidas de absorción y emisión. Se realizarán estudios preliminares de la funcionalización del sistema con colorantes.

segell del Departament)

**TEMA TREBALL FI DE GRAU
GRAU EN QUÍMICA**

Curs Acadèmic: 2015-2016

TUTOR DEL PROJECTE: José R. Pedro Llinares/Carlos Vila Descals

TUTOR ACADÈMIC: José R. Pedro Llinares/ Carlos Vila Descals

TÍTOL PROVISIONAL

Reacciones de alquilación enantioselectiva de derivados del 1,1-dióxido benzo[d]isotiazol-3-carboxilato de etilo

OBJETIUS

Es bien conocida la importancia de la quiralidad de las moléculas orgánicas en distintas áreas, que abarcan desde la Biología a la Ciencia de Materiales. En un principio la quiralidad molecular podía parecer una curiosidad química, sin importancia o trascendencia más allá del interés puramente científico. Sin embargo, la tragedia de la talidomida puso de manifiesto, de una manera cruel, la importancia de la quiralidad en las moléculas orgánicas con actividad farmacológica. También en el campo de la Ciencia de Materiales se conoce que las propiedades que exhiben los materiales ópticos y electrónicos dependen de conjuntos moleculares altamente ordenados y que, en muchos casos, esta ordenación depende de la quiralidad.

Así, el desarrollo de nuevos métodos de síntesis enantioselectiva¹ constituye en la actualidad un área de intensa investigación. Entre ellos, los procedimientos catalíticos (catálisis asimétrica) resultan especialmente atractivos ya que permiten minimizar el consumo de quiralidad y disminuir la producción de residuos.²

En este contexto las reacciones de adición nucleofílica enantioselectiva a dobles enlaces C=N constituyen métodos sintéticos de enorme importancia ya que las aminas quirales resultantes presentan estructuras altamente funcionalizadas de gran valor en la síntesis de una amplia variedad de productos naturales y farmacéuticos.

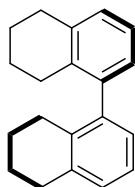
Así en este proyecto se plantea como objetivo el estudio de la adición nucleofílica, en concreto de alquinos terminales, a 1,1-dióxido benzo[d]isotiazol-3-carboxilato de etilo.



METODOLOGIA

Se seguirá una metodología similar a la utilizada por nuestro grupo de investigación en otras reacciones enantioselectivas de adición a aldiminas.³ En concreto se llevará a cabo

- 1) Preparación de diferentes 1,1-dióxido benzo[*d*]isotiazol-3-carboxilato de alquilo.
- 2) Identificación de las condiciones óptimas de reacción, en lo que hace referencia al rendimiento de la reacción y, en especial, a la enantioselectividad, utilizando distintos BINOLES (**L1-L6**) así como VAPOL (**L7**) y VANOL (**L8**) como ligandos quirales. En cuanto al nucleófilo utilizado se estudiará la reacción con fenilacetileno.



- 3) Estudio del alcance y limitaciones de la reacción, utilizando distintos alquinos y diferentes 1,1-dióxido benzo[*d*]isotiazol-3-carboxilato de alquilo.



BIBLIOGRAFIA

1. a) *New Frontiers in Asymmetric Catalysis*, K. Mikami, M. Lautens Eds., Wiley: New Jersey, 2007; b) *Enantioselective organocatalysis*. Dalko, P. I. Ed.; Wiley-VCH: Weinheim, 2007; c) *Asymmetric Organocatalysis*. Berkessel, A.; Gröger, H.; Wiley-VCH, Weinheim, 2005.
2. *Green Chemistry. Frontiers in Benign Chemical Synthesis and Processes*, P-T. Anastas, T.C. Williamson Eds., Oxford University Press: Oxford, 1998.
3. L. de Munck, A. Monleón, C. Vila, M. Carmen Muñoz, J. R. Pedro, *Org. Biomol. Chem.* 2015, DOI: 10.1039/C5OB01012H.

(segell del Departament)

**TEMA TREBALL FI DE GRAU
GRAU EN QUÍMICA**

Curs acadèmic 2015/2016

TUTOR DEL PROJECTE: Luis R. Domingo

TUTOR ACADÈMIC:

TÍTOL PROVISIONAL: Caracterización teórica de interacciones débiles por puentes de hidrógeno.

OBJECTIUS

El objetivo del trabajo de fin de grado es la caracterización de puentes de hidrógeno en moléculas orgánicas entre hidrógenos relativamente ácidos y heteroátomos con pares de electrones no compartidos y sistemas con dobles enlaces C=C utilizando diversos métodos computacionales.

METODOLOGIA

Tras seleccionar un conjunto de moléculas orgánicas capaces de formar puentes de hidrógenos tanto intermoleculares como intramoleculares, se llevará a cabo un estudio de estas interacciones débiles utilizando diferentes aproximaciones computacionales, y a continuación se compararán los resultados obtenidos con las diferentes metodologías empleadas.

(segell del Departament)

**TEMA TREBALL FI DE GRAU
GRAU EN QUÍMICA**

Curs acadèmic 2015/2016

TUTOR DEL PROJECTE: María José Aurell Piquer

TUTOR ACADÈMIC:

TÍTOL PROVISIONAL: Establecimiento de escalas de electrofilia y nucleofilia teóricas.

OBJECTIUS

En 2002 y 2008 establecimos, respectivamente, las primeras escalas de electrofilia y nucleofilia teóricas mediante cálculos B3LYP/6-31G*. En los últimos años se ha estandarizado el uso de funcionales como el MPWB1K y el M06X. En el presente trabajo de fin de grado se calcularán los índices de electrofilia y nucleofilia mediante el uso de estos funcionales con el fin de establecer las correspondientes escalas de reactividad.

METODOLOGIA

Las 20 estructuras que se emplearon para establecer las escalas de electrofilia y nucleofilia teóricas mediante cálculos B3LYP/6-31G* se optimizarán usando los funcionales MPWB1K y M06X, y se calcularán los correspondientes índices de reactividad. Después de establecer las correspondientes escalas, se analizarán las correlaciones lineales que hay entre ellas.

(segell del Departament)

**TEMA TRABAJO FIN DE GRADO
GRADO EN QUIMICA**

Curs acadèmic 2015-2016

TUTOR DEL PROYECTO: Dra. Ana C. Cuñat Romero y Dr. Juan Francisco Sanz Cervera

TUTORA ACADÉMICA: Dr. Juan Francisco Sanz Cervera y Dra. Ana Cuñat Romero

TITULO PROVISIONAL

Diseño y síntesis de compuestos potencialmente activos como antitumorales. I

OBJETIVOS

Tenemos como objetivo la preparación de nuevos candidatos a ensayos preclínicos con actividad anticancerígena. Como referencia, se partirá de estructuras similares a otras ya conocidas que ya han demostrado capacidad antimetabólica (impiden la división celular) mediante la estabilización o desestabilización de la tubulina, una proteína clave en el proceso de división celular, clave en el desarrollo de tumores.

METODOLOGÍA

Los compuestos se sintetizarán mediante síntesis orgánica convencional, y su actividad antitumoral se evaluará en los laboratorios del Prof. Miguel Carda, de Universitat Jaume I de Castellón, con el que colaboramos en este tema. Una vez conocida la actividad de la primera tanda de compuestos, se prepararán varias adicionales con la finalidad de mejorar la potencia y disminuir la toxicidad del hit inicial. La finalidad es llegar a preparar compuestos con actividad antitumoral hasta obtener un candidato a ensayos preclínicos.

**TEMA TRABAJO FIN DE GRADO
GRADO EN QUIMICA**

Curs acadèmic 2015-2016

TUTOR DEL PROYECTO: Dr. Juan Francisco Sanz Cervera y Dra. Ana C. Cuñat Romero

TUTORA ACADÉMICA: Dra. Ana C. Cuñat Romero y Dr. Juan Francisco Sanz Cervera

TITULO PROVISIONAL

Diseño y síntesis de compuestos potencialmente activos como antitumorales. II

OBJETIVOS

Tenemos como objetivo la preparación de nuevos candidatos a ensayos preclínicos con actividad anticancerígena. Como referencia, se partirá de estructuras similares a otras ya conocidas que ya han demostrado capacidad antimetabólica (impiden la división celular) mediante la estabilización o desestabilización de la tubulina, una proteína clave en el proceso de división celular, clave en el desarrollo de tumores.

METODOLOGÍA

Los compuestos se sintetizarán mediante síntesis orgánica convencional, y su actividad antitumoral se evaluará en los laboratorios del Prof. Miguel Carda, de Universitat Jaume I de Castellón, con el que colaboramos en este tema. Una vez conocida la actividad de la primera tanda de compuestos, se prepararán varias adicionales con la finalidad de mejorar la potencia y disminuir la toxicidad del hit inicial. La finalidad es llegar a preparar compuestos con actividad antitumoral hasta obtener un candidato a ensayos preclínicos.

**TEMA TRABAJO FIN DE GRADO
GRADO EN QUIMICA**

Curs acadèmic 2015-2016

TUTOR DEL PROYECTO: Dr. Juan Francisco Sanz Cervera y Dra. Ana C. Cuñat Romero

TUTORA ACADÉMICA: Dra. Ana C. Cuñat Romero y Dr. Juan Francisco Sanz Cervera

TITULO PROVISIONAL

Diseño y síntesis de compuestos potencialmente activos como antitumorales. III

OBJETIVOS

Tenemos como objetivo la preparación de nuevos candidatos a ensayos preclínicos con actividad anticancerígena. Como referencia, se partirá de estructuras similares a otras ya conocidas que ya han demostrado capacidad antimetabólica (impiden la división celular) mediante la estabilización o desestabilización de la tubulina, una proteína clave en el proceso de división celular, clave en el desarrollo de tumores.

METODOLOGÍA

Los compuestos se sintetizarán mediante síntesis orgánica convencional, y su actividad antitumoral se evaluará en los laboratorios del Prof. Miguel Carda, de Universitat Jaume I de Castellón, con el que colaboramos en este tema. Una vez conocida la actividad de la primera tanda de compuestos, se prepararán varias adicionales con la finalidad de mejorar la potencia y disminuir la toxicidad del hit inicial. La finalidad es llegar a preparar compuestos con actividad antitumoral hasta obtener un candidato a ensayos preclínicos.

**TEMA TRABAJO FIN DE GRADO
GRADO EN QUIMICA**

Curs acadèmic 2015-2016

TUTOR DEL PROYECTO: Dra. Ana C. Cuñat Romero y Dr. Juan Francisco Sanz Cervera

TUTORA ACADÉMICA: Dr. Juan Francisco Sanz Cervera y Dra. Ana C. Cuñat Romero

TITULO PROVISIONAL

Diseño y síntesis de compuestos potencialmente activos como antitumorales. IV

OBJETIVOS

Tenemos como objetivo la preparación de nuevos candidatos a ensayos preclínicos con actividad anticancerígena. Como referencia, se partirá de estructuras similares a otras ya conocidas que ya han demostrado capacidad antimetabólica (impiden la división celular) mediante la estabilización o desestabilización de la tubulina, una proteína clave en el proceso de división celular, clave en el desarrollo de tumores.

METODOLOGÍA

Los compuestos se sintetizarán mediante síntesis orgánica convencional, y su actividad antitumoral se evaluará en los laboratorios del Prof. Miguel Carda, de Universitat Jaume I de Castellón, con el que colaboramos en este tema. Una vez conocida la actividad de la primera tanda de compuestos, se prepararán varias adicionales con la finalidad de mejorar la potencia y disminuir la toxicidad del hit inicial. La finalidad es llegar a preparar compuestos con actividad antitumoral hasta obtener un candidato a ensayos preclínicos.

TEMA TRABAJO FIN DE GRADO
GRADO EN QUIMICA

TUTOR DEL PROYECTO: Santos Fustero Lardiés

TUTOR ACADÉMICO: Santos Fustero Lardiés y Antonio Simón

TITULO PROVISIONAL

Estudio de la relación actividad-estructura de los *p*-terfenilos miméticos de la proteína *Rev*.

OBJETIVOS

El objetivo principal de este proyecto es la síntesis de nuevos compuestos *p*-terfenílicos y, en colaboración con los grupos de Gallego (Universidad Católica de Valencia San Vicente Martír) y Alcamí (Instituto de Salud Carlos III), la evaluación de la actividad biológica de dichos compuestos respecto a la inhibición de la interacción RRE-*Rev* en el VIH-1.

METODOLOGÍA

Recientemente en nuestro grupo se han desarrollado compuestos *p*-terfenílicos capaces de mimetizar la estructura 3D de la proteína *Rev*.¹ Mediante métodos computacionales, se ha podido diseñar una serie de compuestos de segunda generación, basada en los resultados ya obtenidos. Dichos compuestos se sintetizarán mediante una ruta sintética desarrollada en el grupo basada en acoplamientos sucesivos de Suzuki-Miyaura. Obtenidos los nuevos compuestos, se testará su actividad biológica para estudiar la relación actividad-estructura de esta familia de compuestos.

(1) González-Bulnes, L.; Ibáñez, I.; Bedoya, L. M.; Beltrán, M.; Catalán, S.; Alcamí, J.; Fustero, S.; Gallego, J. *Angew. Chem. - Int. Ed.* **2013**, *52* (50), 13405.



**TEMA TRABAJO FIN DE GRADO
GRADO EN QUIMICA**

Curso académico 2015-2016

TUTOR DEL PROYECTO: Consuelo Agulló Blanes y Josep Vicent Mercader Badia

TUTOR ACADÉMICO: Consuelo Agulló Blanes

TITULO PROVISIONAL

Desarrollo y validación de un inmunoensayo para la determinación de residuos del fungicida fluxapyroxad en alimentos

OBJETIVOS

Fluxapyroxad es un nuevo principio activo, desarrollado por BASF, con un amplio espectro antifúngico. Se trata de una carboxamida cuyo modo de acción consiste en la inhibición de la enzima succinato deshidrogenasa. Recientemente su comercialización ha sido aprobada en la UE, quien ha fijado un LMR de 1.5 mg/kg para ciruelas. El presente proyecto tiene como objetivo el desarrollo de un ensayo rápido tipo ELISA competitivo utilizando anticuerpos y su validación frente a métodos cromatográficos para el análisis de los residuos de este plaguicida en alimentos.

METODOLOGÍA

1. Selección de inmunorreactivos mediante ELISA competitivo bidimensional. Valoración de la heterología de conjugado de ensayo.
2. Estudio de la influencia de diferentes factores fisicoquímicos (pH, fuerza iónica y concentración de disolventes) sobre los parámetros analíticos del inmunoensayo seleccionado.
3. Optimización de las condiciones de inmunoensayo.
4. Determinación de la precisión y exactitud del método utilizando muestras de alimentos fortificadas con fluxapyroxad.
5. Extracción de residuos a partir de muestras de alimentos tratados aplicando la metodología QuEChERS.
6. Determinación de la concentración de fluxapyroxad en los extractos por ELISA competitivo.
7. Determinación de la concentración de fluxapyroxad en los extractos por cromatografía líquida acoplada a un espectrómetro de masas en tándem.
8. Análisis estadístico de los resultados y comparación de ambos métodos.



TEMA TREBALL FI DE GRAU
GRAU EN QUÍMICA

Curs acadèmic 2015-16

TUTOR DEL PROJECTE: Prof. Phillipe Compain

TUTOR ACADÈMIC: Prof. José Ramón Pedro Llinares

TÍTOL PROVISIONAL

New method for the desoxygenation of compounds in alfa-position of a carbonyl with PPh_3/I_2 / Pyridine

OBJETIUS

Desoxygenation of compounds in alfa-position of a carbonyl group

METODOLOGIA

Estándar en síntesis orgánica



TEMA TREBALL FI DE GRAU
GRAU EN QUÍMICA

Curs acadèmic 2015-16

TUTOR DEL PROJECTE: M^a LUZ CARDONA PRÓSPER

TUTOR ACADÈMIC: M^a LUZ CARDONA PRÓSPER

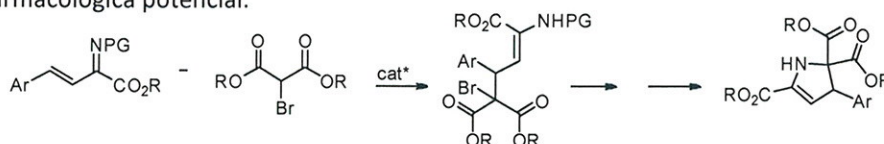
TÍTOL PROVISIONAL

Adición enantioselectiva de bromomalonato a iminas insaturadas

OBJETIUS

Síntesis de nuevos compuestos quirales mediante adición enantioselectiva de bromomalonato a diferentes iminas insaturadas utilizando catalizadores metálicos (complejos metálicos y organocatalizadores).

Modificación funcional de los productos obtenidos para sintetizar compuestos heterocíclicos quirales con actividad biológica y farmacológica potencial.



METODOLOGIA

Optimización de las condiciones de reacción: ensayo con diferentes catalizadores, disolventes, aditivos, temperaturas etc.

Estudio del alcance de la reacción utilizando las condiciones optimizadas utilizando diferentes sustratos.

Modificaciones estructurales de los productos obtenidos para la obtención de compuestos potencialmente bioactivos.

Competencias a adquirir:

- Búsqueda bibliográfica
- Técnicas de síntesis orgánica
- Técnicas cromatográficas (cromatografía de capa fina y columna)
- Análisis estructural (RMN, EM, etc)
- Análisis instrumental (HPLC, CG, etc)



(Seguell del Departament)

TEMA TREBALL FI DE GRAU
GRAU EN QUÍMICA

Curs acadèmic 2015-2016

TUTOR DEL PROJECTE: Gregorio Asensio y Mercedes Medio Simón

TUTOR ACADÈMIC: Gregorio Asensio y Mercedes Medio Simón

TÍTOL PROVISIONAL

Preparación de catalizadores de tipo homoescorpionato a partir de pirazoles sintetizados por metodologías avanzadas.

OBJETIUS

Desarrollo de nuevas metodologías para la síntesis multigramo de pirazoles.
Utilización de los pirazoles en la preparación de catalizadores de tipo homoescorpionato.
Aplicación de los catalizadores para reacciones de inserción en enlaces C-H de alcanos

METODOLOGIA

Las metodologías seguidas serán las habituales en los trabajos de Síntesis Orgánica y catálisis con metales de transición: Trabajo en atmósfera inerte. Realización de reacciones tanto a escala multigramo (síntesis de ligando) como a escala miligramo (ensayos de catálisis). Utilización de técnicas de cromatografía y espectroscópicas.



(Seguell del Departament)

TEMA TREBALL FI DE GRAU
GRAU EN QUÍMICA

Curs acadèmic 2015-2016

TUTOR DEL PROJECTE: Gregorio Asensio

TUTOR ACADÈMIC: Gregorio Asensio

TÍTOL PROVISIONAL

Síntesis de índoles y compuestos relacionados mediante reacciones en cascada catalizadas por complejos de metales de transición

OBJETIUS

Estudiar las posibilidades de llevar a cabo reacciones en cascada para la síntesis de moléculas complejas a partir de sustratos sencillos mediante reacciones consecutivas de formación de enlaces carbono-carbono y carbono-heteroátomo utilizando complejos de metales de transición, especialmente complejos de oro.

METODOLOGIA

Las metodologías seguidas serán las habituales en los trabajos de Síntesis Orgánica y catálisis con metales de transición: Trabajo en atmósfera inerte. Realización de reacciones a microescala. Utilización de técnicas de cromatografía y espectroscópicas.



(Seguell del Departament)