

TEMA TREBALL FI DE GRAU GRAU EN QUÍMICA

TUTOR/A ACADÈMIC/A: Antonio Abad Somovilla

TUTOR/A del TREBALL (si escau)*:

TUTOR/A EXTERN/A (si escau): Antonio Abad Fuentes

TÍTOL

Síntesis de nuevos derivados hapténicos y conjugados proteicos de un herbicida

OBJECTIUS

El presente proyecto tiene como objetivo la preparación por síntesis total de nuevos haptenos del herbicida Dicamba, un antiguo herbicida cuya utilización para el control de maleza en cultivos de plantas de maíz transgénicas resistentes al mismo se ha extendido ampliamente por todo el mundo. A partir de estos derivados se preparan conjugados proteicos que se utilizaran para el desarrollo de métodos analíticos inmunoquímicos para la determinación y cuantificación de residuos del herbicida en maíz y aguas.

METODOLOGIA

- Búsqueda bibliográfica dirigida.
- Lectura y análisis de la bibliografía más relevante.
- Análisis de la metodología sintética más adecuada para alcanzar el objetivo.
- Desarrollo de la secuencia sintética utilizando diferentes técnicas sintéticas, que incluirán entre otros: i) Desarrollo de reacciones a temperatura variable (-78°C hasta $+200^{\circ}\text{C}$) ; 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 productos y conjugados por técnicas espectroscópicas mono y bidimensionales de RMN, espectrometría de masas, MALDI-TOF-MS, etc.
- Discusión de los resultados alcanzados.
- Elaboración de la memoria y preparación de la presentación pública

* només en el cas de què algun dels tutors no complisca els requisits per a ser tutor acadèmic



(segell del Departament)

TEMA TREBALL FI DE GRAU GRAU EN QUÍMICA

TUTOR/A ACADÈMIC/A: Consuelo Agulló Blanes

TUTOR/A del TREBALL (si escau)*:

TUTOR/A EXTERN/A (si escau): Josep Vicent Mercader Badía

TÍTOL

Síntesis de nuevos haptenos y bioconjugados de la micotoxina alternariol

OBJECTIUS

El presente proyecto tiene como objetivo la preparación por síntesis total de nuevos haptenos de alternariol, una micotoxina producida por el hongo alternaria que contamina muchos tipos de alimentos. Estos derivados presentan modificaciones estructurales respecto otros haptenos inmunogénicos de alternariol previamente preparados y sus conjugados proteicos se utilizaran para para el desarrollo de métodos inmunoquímicos para la determinación analítica de residuos de esta micotoxina en alimentos.

METODOLOGIA

- Búsqueda bibliográfica dirigida.
- Lectura y análisis de la bibliografía más relevante.
- Análisis de la metodología sintética más adecuada para alcanzar el objetivo.
- 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) ; 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 productos y conjugados por técnicas espectroscópicas mono y bidimensionales de RMN, espectrometría de masas, MALDI-TOF-MS, etc.
- Discusión de los resultados alcanzados.
- Elaboración de la memoria y preparación de la presentación pública



* només en el cas de què algun dels tutors no complisca els requisits per a ser tutor acadèmic

TEMA TREBALL FI DE GRAU
GRAU EN QUÍMICA

TUTOR/A ACADEMIC/A: AMPARO ASENSIO MARTINEZ

TUTOR/A del TREBALL (si escau)*:

TUTOR/A EXTERN/A (si escau):

TÍTOL

PLASTICOS EN LA INDUSTRIA Y SU IMPACTO MEDIOAMBIENTAL.
Revisión bibliográfica

OBJECTIUS

Revisión bibliográfica centrada en los plásticos actuales, su degradación, contaminación del medioambiente y su presencia en la industria alimentaria.

METODOLOGIA

Se utilizará el Scifinder School, todas las fuentes electrónicas disponibles en la Universitat así como revistas especializadas, monografías y artículos más recientes publicados sobre el tema.

* només en el cas de què algun dels tutors no complisca els requisits per a ser tutor acadèmic



(segell del Departament)

TEMA TREBALL FI DE GRAU
GRAU EN QUÍMICA

TUTOR/A ACADÈMIC/A: María José Aurell Piquer y Ramón José Zaragoza Cardells

TUTOR/A del TREBALL (si escau)*: _____

TUTOR/A EXTERN/A (si escau): _____

TÍTOL

Estudio mecanístico mediante cálculos DFT de reacciones asimétricas catalizadas por Carbenos N-heterocíclicos: Una revisión bibliográfica

OBJECTIUS

Los carbenos N-heterocíclicos quirales se están utilizando como catalizadores en síntesis enantioselectiva de compuestos orgánicos.

Se han propuesto diferentes mecanismos de reacción usando cálculos DFT.

Se propone realizar una búsqueda y clasificación de estos mecanismos.

METODOLOGIA

La búsqueda bibliográfica se realizará utilizando las bases de datos y herramientas de búsqueda disponibles en la Universidad de Valencia tales como Web of Science y SCIFINDER entre otras.

Posteriormente se utilizarán los programas adecuados (CHEMDRAW, WORD, EXCEL...) para la realización de los gráficos, tablas y textos.



* només en el cas de què algun dels tutors no complisca els requisits per a ser tutor acadèmic

TEMA TREBALL FI DE GRAU
GRAU EN QUÍMICA

TUTOR/A ACADÈMIC/A: María José Aurell Piquer y Ramón José Zaragoza Cardells

TUTOR/A del TREBALL (si escau)*:

TUTOR/A EXTERN/A (si escau):

TÍTOL

Estudio mecanístico de las reacciones S_Ni(Sustitución Nucleófila interna) : Una revisión bibliográfica

OBJECTIUS

Realizar una búsqueda, identificación y clasificación de las diferentes propuestas mecanísticas en las reacciones de Sustitución Nucleófila interna (S_Ni).

METODOLOGIA

La búsqueda bibliográfica se realizará utilizando las bases de datos y herramientas de búsqueda disponibles en la Universidad de Valencia tales como Web of Science y SCIFINDER entre otras.

Posteriormente se utilizarán los programas adecuados (CHEMDRAW, WORD, EXCEL...) para la realización de los gráficos, tablas y textos.

* només en el cas de què algun dels tutors no complisca els requisits per a ser tutor acadèmic



(segell del Departament)

TEMA TREBALL FI DE GRAU
GRAU EN QUÍMICA

TUTOR/A ACADÈMIC/A: Rafael Ballesteros Campos y Rafael Ballesteros Garrido

TUTOR/A del TREBALL (si escau)*:

TUTOR/A EXTERN/A (si escau):

TÍTOL

Reacciones de Apertura de Triazolopiridinas con catalizadores heterogéneo.

OBJECTIUS

Estudio de reacciones de apertura de sistemas triazolopiridina-piridina con catalizadores heterogéneos y etilenglicol.

METODOLOGIA



* només en el cas de què algun dels tutors no complisca els requisits per a ser tutor acadèmic

(segell del Departament)

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

TUTOR/A ACADÈMIC/A: Rafael Ballesteros Garrido

TUTOR/A del TREBALL (si escau)*:

TUTOR/A EXTERN/A (si escau):

TÍTOL

Procesos de autotransferencia de hidrogeno con catalizadores heterogéneos para la obtención de complejidad molecular

OBJECTIUS

Estudio de reacciones de Autotransferencia de Hidrógeno con aminas poliaromáticas y dioles usando diferentes catalizadores heterogéneos.

METODOLOGIA

- * Revisión Bibliográfica
- * Estudio de Catalizadores en reacciones de AH/BH con dioles y anilinas aromáticas.
- * Estudio de Aplicabilidad con diferentes sustratos
- * Caracterización completa de los productos

Bibliografia seleccionada:

a) Watson, A.J.A.; Williams, J.M.J. Science 2010, 329, 635–636. (b) Hamid, M.H.S.A.; Slatford, P.A.; Williams, J.M.J. Adv. Synth. and Cat. 2007, 349, 1555-1575. (c) Guillena, G.; Ramon, D.J.; Yus, M. Chem. Rev. 2010, 110, 1611-1641. (d) Adam, R.; Ballesteros, R.; Abarca, B. Org. Biomol. Chem. 2012, 10, 1826-1833. e) Muzart, J. Eur. J. Org. Chem. 2015, 5693–5707. (f) Llabres-Campaner, P.J.; Ballesteros-Garrido, R.; Ballesteros, R.; Abarca, B. Tetrahedron, 2017, 73, 5552-556; J. Org. Chem. 2018 83 1521-526

* només en el cas de què algun dels tutors no complisca els requisits per a ser tutor acadèmic



(segell del Departament)

TEMA TREBALL FI DE GRAU
GRAU EN QUÍMICA

TUTOR/A ACADÈMIC/A: Rafael Ballesteros Garrido

TUTOR/A del TREBALL (si escau)*:

TUTOR/A EXTERN/A (si escau):

TÍTOL

Reacciones de condensación deshidrogenativa (ADH) para la síntesis de heterociclos

OBJECTIUS

Estudio de reacciones de condensación deshidrogenativa con dioles usando diferentes catalizadores heterogéneos y aminas aromáticas para obtención de heterociclos.

METODOLOGIA

- * Revisión Bibliográfica
- * Estudio de Catalizadores en reacciones ADH con dioles y anilinas aromáticas.
- * Estudio de Aplicabilidad con diferentes sustratos
- * Caracterización completa de los productos

Bibliografia seleccionada:

a) Watson, A.J.A.; Williams, J.M.J. Science 2010, 329, 635–636. (b) Hamid, M.H.S.A.; Slatford, P.A.; Williams, J.M.J. Adv. Synth. and Cat. 2007, 349, 1555-1575. (c) Guillena, G.; Ramon, D.J.; Yus, M. Chem. Rev. 2010, 110, 1611-1641. (d) Adam, R.; Ballesteros, R.; Abarca, B. Org. Biomol. Chem. 2012, 10, 1826-1833. e) Muzart, J. Eur. J. Org. Chem. 2015, 5693–5707. (f) Llabres-Campaner, P.J.; Ballesteros-Garrido, R.; Ballesteros, R.; Abarca, B. Tetrahedron, 2017, 73, 5552-556; J. Org. Chem. 2018 83 1521-1526

* només en el cas de què algun dels tutors no complisca els requisits per a ser tutor acadèmic



TEMA TREBALL FI DE GRAU GRAU EN QUÍMICA

TUTOR/A ACADÈMIC/A: GONZALO BLAY LLINARES

TUTOR/A del TREBALL (si escau)*:

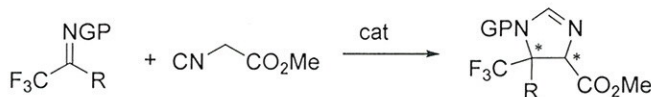
TUTOR/A EXTERN/A (si escau):

TÍTOL

Reacciones de adición enantioselectiva de isocianoacetatos a iminas fluoradas

OBJECTIUS

- Desenvolupar un procediment per a la reacció d'addició entre isocianoacetats i imines fluorades per a donar imidazolidines quirals fluorades mitjançant metodologies sintètiques enantioselectives basades en el ús de catalitzadors quirals.
- Síntesi de compostos nitrogenats quirals.
- Modificació funcional dels productes obtinguts per a sintetitzar heterocicles quirals.



METODOLOGIA

- La metodologia se basa en el ús de catalitzadors quirals, constituïts per complexos metàl·lics de zinc. Se utilitzarà una reacció model per a portar a terme l'optimització de les condicions de reacció ensayant diversos catalitzadors, dissolvents, additius, temperatures, etc. Una vegada establertes les condicions òptimes se estudiarà l'abast de la reacció amb diferents substrats. Finalment se estudiaran modificacions funcionals dels productes enriquits enantiomèricament per a la seva conversió en compostos de valor afegit.

El alumne hauria d'adquirir competències en els següents aspectes:

- Búsqueda bibliogràfica.
- Tècniques de síntesi orgànica.
- Tècniques cromatogràfiques (cromatografia de capa fina i de columna)
- Anàlisi estructural (RMN, EM, etc.)
- Anàlisi instrumental (HPLC, CG, etc.)

* només en el cas de que algun dels tutors no complisca els requisits per a ser tutor acadèmic



(segell del Departament)

TEMA TREBALL FI DE GRAU GRAU EN QUÍMICA

TUTOR/A ACADÈMIC/A: GONZALO BLAY LLINARES

TUTOR/A del TREBALL (si escau)*:

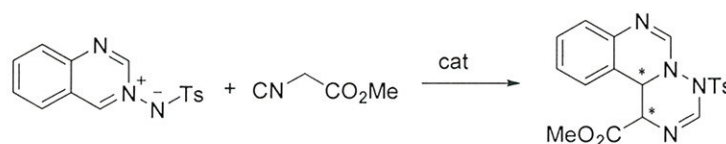
TUTOR/A EXTERN/A (si escau):

TÍTOL

Reacciones de cicloadición [3+3] enantioselectivas entre isocianoacetatos e iluros de *N*-iminoquinazolinio

OBJECTIUS

- Desenvolupar un procediment per a la reacció de cicloadició entre isocianoacetats e ilurs de *N*-iminoquinazolinio per a donar derivats de quinazolina quirals mitjançant metodologies sintètiques enantioselectives basades en el ús de catalitzadors quirals.
- Síntesi de compostos nitrogenats quirals.
- Modificació funcional de els productes obtinguts per sintetitzar heterocicls quirals.



METODOLOGIA

- La metodologia se basa en el ús de catalitzadors quirals, constituïts per complexos metàl·lics de zinc. Se utilitzarà una reacció model per a portar a terme l'optimització de les condicions de reacció ensayant diversos catalitzadors, disolvents, additius, temperatures, etc. Una vegada establertes les condicions òptimes se estudiarà l'abast de la reacció amb diferents substrats. Finalment se estudiaran modificacions funcionals dels productes enriquits enantiomèricament per a la seva conversió en compostos de valor afegit.

El alumne hauria d'adquirir competències en els següents aspectes:

- Búsqueda bibliogràfica.
- Tècniques de síntesi orgànica.
- Tècniques cromatogràfiques (cromatografia de capa fina i de columna)
- Anàlisi estructural (RMN, EM, etc.)
- Anàlisi instrumental (HPLC, CG, etc.)



* només en el cas de què algun dels tutors no complisca els requisits per a ser tutor acadèmic

VNIVERSITAT DE VALÈNCIA Facultat de Química

TEMA TREBALL FI DE GRAU GRAU EN QUÍMICA

TUTOR/A ACADÈMIC/A: M^a LUZ CARDONA PRÓSPER

TUTOR/A del TREBALL (si escau)*: NURIA CABEDO ESCRIG

TUTOR/A EXTERN/A (si escau):

TÍTOL

Synthesis of bioactive molecules

OBJECTIUS

Synthesis of organic molecules potentially bioactives like , for exemple, with isoquinoline skeleton.

METODOLOGIA

- Synthesis of the target molecules using organic synthetic techniques and separation and isolation techniques of the products.
- Spectroscopic characterization of the molecules synthesized by NMR, Mass, Ir etc.
- Biological activity tests



* només en el cas de què algun dels tutors no complisca els requisits per a ser tutor acadèmic

VNIVERSITAT DE VALÈNCIA Facultat de Química

TEMA TREBALL FI DE GRAU GRAU EN QUÍMICA

TUTOR/A ACADÈMIC/A: M^a LUZ CARDONA PRÓSPER

TUTOR/A del TREBALL (si escau)*: _____

TUTOR/A EXTERN/A (si escau): _____

TÍTOL

Estudio bibliográfico de reacciones de cicloadición [3+2] enantioselectivas de iluros de N-iminoquinazolonio.

OBJECTIUS

Revisión bibliográfica de las reacciones de cicloadición [3+2] enantioselectivas de iluros de N-iminoquinazolonio con el objetivo de conocer el alcance actual de dichas reacciones para poner a punto nuevas reacciones enantioselectivas utilizando ese tipo de sustratos.

METODOLOGIA

Para llevar a cabo dicho trabajo de revisión se hará uso de las bases de datos, monografías y revistas de las que dispone la Universidad de Valencia.



* només en el cas de què algun dels tutors no complisca els requisits per a ser tutor acadèmic

TEMA TREBALL FI DE GRAU
GRAU EN QUÍMICA

TUTOR/A ACADÈMIC/A: Ana M^a Costero Nieto

TUTOR/A del TREBALL (si escau)*: Ana M^a Costero Nieto

TUTOR/A EXTERN/A (si escau):

TÍTOL

Estudio de la variación local del pH inducida por luz

OBJECTIUS

- Diseño y síntesis de una puerta molecular cuya irradiación liberará un ácido carboxílico.
- Evaluación de su capacidad para la modificación local del pH.

METODOLOGIA

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.

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 evaluará su capacidad para variar el pH de forma local mediante las técnicas apropiadas. Se determinará el alcance y reproducibilidad del sistema.

Si es posible se anclará dicha puerta a un soporte sólido, tipo MCM-41, para poder evaluar la mejora en la estrategia desarrollada.

* només en el cas de què algun dels tutors no complisca els requisits per a ser tutor acadèmic



TEMA TREBALL FI DE GRAU
GRAU EN QUÍMICA

TUTOR/A ACADÈMIC/A: Ana Carmen Cuñat Romero

TUTOR/A del TREBALL (si escau)*: _____

TUTOR/A EXTERN/A (si escau): _____

TÍTOL

Química Sostenible para combatir la malaria

OBJECTIUS

Estudio bibliográfico sobre los avances desarrollados en la preparación de nuevos agentes antimaláricos

METODOLOGIA

Tomando como base bibliografía reciente, ampliar la búsqueda bibliográfica centrando la atención en los aspectos relacionados con la preparación sostenible de agentes antimaláricos, principalmente derivados de artemisinina.

Plasmar por escrito lo más relevante dentro de los contextos de la química sostenible y de la continua investigación en la búsqueda de nuevos y mejores antimaláricos.

* només en el cas de què algun dels tutors no complisca els requisits per a ser tutor acadèmic



TEMA TREBALL FI DE GRAU
GRAU EN QUÍMICA

TUTOR/A ACADÈMIC/A: Ana Carmen Cuñat Romero

TUTOR/A del TREBALL (si escau)*: _____

TUTOR/A EXTERN/A (si escau): _____

TÍTOL

La revolución en el mundo de los colorantes alimentarios

OBJECTIUS

Realizar un estudio bibliográfico sobre el tema de los colorantes alimentarios

METODOLOGIA

Tomando como base referencias actualizadas, ampliar la búsqueda sobre el tema de los colorantes alimentarios.

Desarrollar un resumen de los aspectos más relevantes desde los antecedentes históricos, tipos de colorantes y evolución en el uso de los mismos.

* només en el cas de què algun dels tutors no complisca els requisits per a ser tutor acadèmic



VNIVERSITAT E VALÈNCIA (ò*) Facultat de Química

TEMA TREBALL FI DE GRAU GRAU EN QUÍMICA

TUTOR/A ACADÈMIC/A: Ana Carmen Cuñat Romero

TUTOR/A del TREBALL (si escau)*: _____

TUTOR/A EXTERN/A (si escau): _____

TÍTOL

Producción de bio-eteno y bio-propeno. Alternativas para la preparación de productos químicos básicos.

OBJECTIUS

Estudio bibliográfico sobre los procesos que se están desarrollando actualmente para convertir la biomasa en materia prima de interés.

METODOLOGIA

Tomando como base un trabajo de investigación que se propondrá al estudiante, se llevará a cabo la búsqueda bibliográfica y posteriormente se elaborará un informe en el que quedarán recogidos los aspectos más relevantes del tema propuesto.

* només en el cas de què algun dels tutors no complisca els requisits per a ser tutor acadèmic



(segell del Departament)

TEMA TREBALL FI DE GRAU
GRAU EN QUÍMICA

TUTOR/A ACADÈMIC/A: Carlos del Pozo Losada y Gloria Alzuet Piña

TUTOR/A del TREBALL (si escau)*:

TUTOR/A EXTERN/A (si escau):

TÍTOL

1,3-AMINOALCOHOLES FLUORADOS COMO LIGANDOS PARA EL DESARROLLO DE
NUEVAS METALONUCLEASAS

OBJECTIUS

En el presente trabajo se evaluará la combinación de 1,3-amino alcoholes fluorados como ligandos de complejos metálicos, y su potencial actividad como metalonucleasas.

METODOLOGIA

Inicialmente se han de preparar los ligandos de tipo amino alcohol, con metodología descrita en nuestro grupo de trabajo. Posteriormente se ensayarán las condiciones de formación de los correspondientes complejos metálicos con sales de cobre para finalmente evaluar su potencial actividad metalonucleasa.

* només en el cas de què algun dels tutors no complisca els requisits per a ser tutor acadèmic



VNIVERSITAT E VALÈNCIA [ò*] Facultat de Química

TEMA TREBALL FI DE GRAU GRAU EN QUÍMICA

TUTOR/A ACADÈMIC/A: Santiago Díaz Oltra

TUTOR/A del TREBALL (si escau)*: _____

TUTOR/A EXTERN/A (si escau): _____

TÍTOL

Avances en la búsqueda de nuevos compuestos antitumorales que interaccionan con las proteínas del citoesqueleto.

OBJECTIUS

Los objetivos pueden ser variados. Por un lado se puede estudiar la utilización de la metodología de síntesis guiada por la diana en el descubrimiento de este tipo de compuestos antitumorales. Por otra parte, se pueden analizar los últimos avances en el desarrollo de los antitumorales combretastatina A-4 y/o MKT-077, y análogos de estas estructuras.

METODOLOGIA

Los estudios que se plantean son de tipo bibliográfico, por lo que consistirán en la búsqueda y análisis de la bibliografía disponible sobre la temática concreta elegida, especialmente la bibliografía más reciente.



* només en el cas de què algun dels tutors no complisca els requisits per a ser tutor acadèmic

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

TUTOR/A ACADÈMIC/A: Luis R.Domingo

TUTOR/A del TREBALL (si escau)*:

TUTOR/A EXTERN/A (si escau):

TÍTOL

Caracterización de Complejos Moleculares de Transferencia de Densidad Electrónica

OBJECTIUS

Recientemente hemos llevado a cabo un estudio dentro de la Teoría de la Densidad Electrónica Molecular las características de los complejos moleculares de transferencia de densidad electrónica, conocidos como complejos de transferencia de carga, de gran interés tanto por propiedades físicas como químicas.

En el presente trabajo de fin de grado se llevará a cabo una búsqueda bibliográfica de algunos de estos complejos de interés industrial, y a continuación se procederá a la optimización geométrica y su caracterización dentro del modelo propuesto.

METODOLOGIA

Junto al aprendizaje de la búsqueda bibliográfica de compuestos orgánicos, el alumno se familiarizará con el uso del paquete de cálculo Gaussian para la optimización geométrica de moléculas orgánicas así como de la caracterización de las propiedades físicas y químicas de las mismas.



* només en el cas de què algun dels tutors no complisca els requisits per a ser tutor acadèmic

TEMA TREBALL FI DE GRAU
GRAU EN QUÍMICA

TUTOR/A ACADEMIC/A: JORGE ESCORIHUELA FUENTES

TUTOR/A del TREBALL (si escau)*:

TUTOR/A EXTERN/A (si escau):

TÍTOL

Estudi bibliogràfic de reaccions de química click: cap a la recerca de la reacció més ràpida

OBJECTIUS

L'objectiu d'aquest treball de fi de grau es de tipus bibliogràfic i consisteix en la recerca i estudi de reaccions de tipus "click" basades en l'ús de sistemes amb tensió estèrica d'anell. Aquestes reaccions són una alternativa a la coneguda cicloadicció 1,3-dipolar azida-alquí de Huisgen catalitzada per coure (I). El terme de "química click" (click chemistry) fou introduït K. B. Sharpless el 2001 per descriure una família de reaccions amb rendiment quantitatiu, amb materials de partida i reactius fàcilment disponibles, sense dissolvents o amb dissolvents benignes (com l'aigua) o fàcilment eliminable, i amb un senzill aïllament del producte final. Aquest grup de reaccions ha despertat un gran interès en la indústria farmacèutica, de materials i d'altres indústries en la capacitat de generar grans biblioteques de compostos orgànics.

METODOLOGIA

El treball de recerca i documentació bibliogràfica es durà a terme fent ús de bases de dades de publicacions científiques com Web of Science o Scopus, on es recopilaran els articles més rellevants en el marc de la química click. Després, les publicacions seleccionades s'analitzaran i es compararan paràmetres com la velocitat de reacció i la seua aplicabilitat a disseny de molècules orgàniques, estudis biomèdics i ciència de materials entre altres.

* només en el cas de què algun dels tutors no complisca els requisits per a ser tutor acadèmic



VNIVERSITAT DE VALÈNCIA Facultat de Química

TEMA TREBALL FI DE GRAU GRAU EN QUÍMICA

TUTOR/A ACADÈMIC/A: ISABEL FERNÁNDEZ PICOT

TUTOR/A del TREBALL (si escau)*:

TUTOR/A EXTERN/A (si escau):

TÍTOL

REACCIONES DE DESAROMATIZACIÓN ENANTIOSELECTIVAS

OBJECTIUS

Es bien conocida la importancia de la quiralidad de las moléculas orgánicas en distintas áreas, que abarcan desde la Biología hasta la Ciencia de Materiales. Así el desarrollo de nuevos métodos de síntesis enantioselectiva 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 de residuos. El objetivo de este trabajo consiste en recopilar y resumir ejemplos de reacciones de desaromatización enantioselectivas.

METODOLOGIA

Trabajo bibliográfico:

- Definición de palabras clave
- Búsqueda bibliográfica en los principales buscadores.
- Elaboración de resúmenes
- Redacción de un trabajo de revisión.



* només en el cas de què algun dels tutors no complisca els requisits per a ser tutor acadèmic

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

TUTOR/A ACADÈMIC/A: Pablo Gaviña Costero

TUTOR/A del TREBALL (si escau)*: Pablo Gaviña Costero

TUTOR/A EXTERN/A (si escau):

TÍTOL

Materials mesoporosos funcionalizados con puertas moleculares para la detección de diaminas

OBJECTIUS

- Diseño y síntesis de puertas moleculares que puedan sufrir ruptura en presencia de diaminas.
- Síntesis y caracterización de materiales mesoporosos conteniendo las puertas anteriormente obtenidas y cargadas con un colorante.
- Evaluación de su capacidad sensora.

METODOLOGIA

Una vez diseñadas las puertas moleculares adecuadas, basadas 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.

Las puertas moleculares deben ser obtenidas, purificadas y caracterizadas haciendo uso de todas las técnicas cromatográficas y espectroscópicas que están a disposición del grupo de investigación.

Una vez caracterizadas, se anclarán dichas puertas a un soporte sólido, tipo MCM-41 y se evaluará su capacidad sensora. Se determinarán los límites de detección y los posibles interferentes.

* només en el cas de què algun dels tutors no complisca els requisits per a ser tutor acadèmic



TEMA TREBALL FI DE GRAU
GRAU EN QUÍMICA

TUTOR/A ACADÈMIC/A: JOSÉ MIGUEL LLINARES BERENGUER

TUTOR/A del TREBALL (si escau)*:

TUTOR/A EXTERN/A (si escau):

TÍTOL

SÍNTESIS DE LIGANDOS POLIAMINICOS Y SU INTERACCIÓN CON ESPECIES ANIÓNICAS O CATIÓNICAS

OBJECTIUS

- Síntesis y caracterización de ligandos poliamínicos .
- Estudios de propiedades ácido/base.
- Interacción con iones metálicos y/o especies aniónicas

METODOLOGIA

- El primer paso será la síntesis orgánica de los ligandos y su caracterización por RMN, EM, etc..
- Se realizarán, siempre que sea posible, los estudios ácido-base empleando técnicas potenciométricas, RMN, UV-Vis y en aquellos casos que sea posible por difracción de Rayos X entre otras técnicas.

* només en el cas de què algun dels tutors no complisca els requisits per a ser tutor acadèmic



(segell del Departament)

VNIVERSITAT DE VALÈNCIA Facultat de Química

TEMA TREBALL FI DE GRAU GRAU EN QUÍMICA

TUTOR/A ACADEMIC/A: Mercedes Medio Simón

TUTOR/A del TREBALL (si escau)*: Raquel Román Parrilla

TUTOR/A EXTERN/A (si escau):

TÍTOL

Estudio y reactividad de eninos halogenados

OBJECTIUS

El principal objetivo es el desarrollo de procedimientos adecuados para la preparación de derivados de iminas fluoradas, intermedios sintéticos versátiles que juegan un papel muy importante en la síntesis de moléculas complejas mediante reacciones finales de cicloadición del tipo Pauson Khand intramolecular. Esta síntesis permitirá generar diversidad estructural en la preparación de nuevos carbociclos y heterociclos enantioméricamente enriquecidos.

METODOLOGIA

La metodología utilizada para llevar a cabo este trabajo englobará diferentes técnicas y procedimientos, así como una primera búsqueda bibliográfica para al estudio de la mejor ruta sintética a seguir, partiendo de sustratos comercialmente disponibles. Sintetizados los correspondientes compuestos intermedios fluorados convenientemente funcionalizados, se llevarán a cabo reacciones de cicloadición del tipo Pauson Khand intramolecular, así como un estudio del alcance de la reacción. Todo esto permitirá al alumno familiarizarse con las técnicas utilizadas en síntesis orgánica, técnicas de purificación (cromatografía en capa fina y columna) y análisis estructural e instrumental (RMN, HPLC, GC-MS, etc).



* només en el cas de què algun dels tutors no complisca els requisits per a ser tutor acadèmic

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

TUTOR/A ACADÈMIC/A: Mercedes Medio Simón

TUTOR/A del TREBALL (si escau)*:

TUTOR/A EXTERN/A (si escau):

TÍTOL

Síntesis y reactividad de nuevos esqueletos fluorados

OBJECTIUS

El objetivo de la presente propuesta de investigación para el trabajo de fin de grado se basa en el estudio de la diferente reactividad de sustratos de partida organofluorados para generar un conjunto de compuestos estructuralmente diversos que presenten una amplia cobertura del espacio químico.

METODOLOGIA

La metodología utilizada para llevar a cabo este trabajo englobará diferentes técnicas y procedimientos, así como una primera búsqueda bibliográfica para al estudio de la mejor ruta sintética a seguir, partiendo de sustratos comercialmente disponibles.

Sintetizados los correspondientes compuestos intermedios fluorados convenientemente funcionalizados, se llevarán a cabo reacciones de cicloadición del tipo Pauson Khand intramolecular, así como un estudio del alcance de la reacción.

Todo esto permitirá al alumno familiarizarse con las técnicas utilizadas en síntesis orgánica, técnicas de purificación (cromatografía en capa fina y columna) y análisis estructural e instrumental (RMN, HPLC, GC-MS, etc).



* només en el cas de què algun dels tutors no complisca els requisits per a ser tutor acadèmic

TEMA TREBALL FI DE GRAU
 GRAU EN QUÍMICA

TUTOR/A ACADÈMIC/A: Andrea Olmos Vergé

TUTOR/A del TREBALL (si escau)*:

TUTOR/A EXTERN/A (si escau):

TÍTOL

Study of the reactivity of pyrazole compounds bearing electron-withdrawing substituents with organolithium reagents
 (Estudio de la reactividad de pirazoles con sustituyentes electrón aceptores con reactivos organolíticos)

OBJECTIUS

El objetivo de la presente propuesta de investigación es el estudio de la anormal reactividad de anillos de pirazol con reactivos organolíticos cuando en el heterociclo hay presentes sustituyentes de tipo electrón aceptor.

METODOLOGIA

La metodología se centrará en la realización de reacciones usando técnicas schlenk entre pirazoles diferentemente sustituidos y diversos compuestos organolíticos alquílicos y arílicos. Con el fin de elucidar el mecanismo de reacción, se intentará aislar los diferentes intermedios. Además, se procederá al seguimiento de las reacciones por técnicas de resonancia magnética nuclear.



* només en el cas de què algun dels tutors no complisca els requisits per a ser tutor acadèmic

TEMA TREBALL FI DE GRAU GRAU EN QUÍMICA

TUTOR/A ACADÈMIC/A: Margarita Parra Alvarez

TUTOR/A del TREBALL (si escau)*: Margarita Parra Alvarez

TUTOR/A EXTERN/A (si escau):

TÍTOL

Aproximación a la detección de drogas de abuso con nanopartículas de oro funcionalizadas

OBJECTIUS

- Diseño y síntesis de dos tipos de nanopartículas de Au funcionalizadas con un grupo tiourea, capaz de coordinar ácidos carboxílicos y un grupo trifluoroacetilo, para la coordinación de un alcohol.
- Evaluar la capacidad del GHB de provocar la agregación de las nanopartículas y por lo tanto poder observar el cambio en la banda de plasmón.

METODOLOGIA

Una vez diseñadas las nanopartículas adecuadas, basadas 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.

Las nanopartículas deben ser obtenidas y caracterizadas haciendo uso de todas las técnicas cromatográficas, espectroscópicas y de microscopía que están a disposición del grupo de investigación.

Una vez caracterizadas se evaluará su capacidad sensora mediante técnicas de espectroscopia UV-Vis. Se determinarán los límites de detección y los posibles interferentes.

* només en el cas de que algun dels tutors no complisca els requisits per a ser tutor acadèmic



UNIVERSITAT DE VALÈNCIA Facultat de Química

TEMA TREBALL FI DE GRAU GRAU EN QUÍMICA

TUTOR/A ACADÈMIC/A: José R. Pedro Llinares

TUTOR/A del TREBALL (si escau)*: Carlos Vila Descals

TUTOR/A EXTERN/A (si escau): _____

TÍTOL

Funcionalització de quinoxalines amb imidazo[1,2-a]piridines via catàlisis fotoredox amb llum visible

OBJECTIUS

El desenvolupament de nous mètodes de síntesis catalítics constitueix en l'actualitat un àrea d'intensa investigació. Entre aquests, els procediments de fotocatalísis (amb llum-visible) resulten especialment atractius ja que permeten la síntesis de diferents molècules utilitzant llum visible com a font d'energia. L'objectiu d'aquest treball és l'estudi de la funcionalització de quinoxalines utilitzant diferents catalitzadors fotoredox.

METODOLOGIA

- 1) Preparació de diferents quinoxalines.
- 2) Preparació de diferents imidazo[1,2-a]piridines
- 3) Identificació de les condicions òptimes de reacció, per tal d'obtenir el millor rendiment de la reacció utilitzant diferents fotocatalitzadors.
- 4) Estudi de l'abast i limitacions de la reacció, utilitzant diferents quinoxalines i imidazo[1,2-a]piridines.

* només en el cas de què algun dels tutors no complisca els requisits per a ser tutor acadèmic



(segell del Departament)

TEMA TREBALL FI DE GRAU GRAU EN QUÍMICA

TUTOR/A ACADÈMIC/A: José R. Pedro Llinares

TUTOR/A del TREBALL (si escau)*: Carlos Vila Descals

TUTOR/A EXTERN/A (si escau): _____

TÍTOL

Alquilació enantioselectiva de pirazolones amb imines cícliques

OBJECTIUS

El desenvolupament de nous mètodes de síntesis enantioselectiva constitueix en l'actualitat un àrea d'intensa investigació. Entre aquestos, els procediments catalítics (catàlisi asimètrica) resulten especialment atractius ja que permeten minimitzar el consum de quiralitat i disminuir la producció de residus. L'objectiu d'aquest treball és l'estudi de l'addició de pirazolones a imines cícliques utilitzant organocatalitzadors bifuncionals.

METODOLOGIA

- 1) Preparació de diferents pirazolones.
- 2) Preparació de diferents imines cícliques.
- 3) Identificació de les condicions òptimes de reacció, per tal d'obtenir el millor rendiment de la reacció i, en especial, la millor enantioselectivitat, utilitzant diferents organocatalitzadors.
- 4) Estudi de l'abast i limitacions de la reacció, utilitzant diferents pirazolones substituïdes i imines cícliques.

* només en el cas de què algun dels tutors no complisca els requisits per a ser tutor acadèmic



(segell del Departament)

TEMA TREBALL FI DE GRAU
GRAU EN QUÍMICA

TUTOR/A ACADÈMIC/A: M^a Teresa Picher Uribes

TUTOR/A del TREBALL (si escau)*: M^a Teresa Picher Uribes

TUTOR/A EXTERN/A (si escau):

TÍTOL

Detección de fármacos por ATR-FTIR

OBJECTIUS

Análisis de fármacos mediante ATR-FTIR, realizando un análisis previo a los distintos patrones y muestras.

METODOLOGIA

El estudio se desarrollará mediante la técnica de Reflectancia Total Atenuada (ATR) acoplada con Transformada de Fourier (FTIR). Esta técnica tiene ventajas sobre la espectroscopia IR convencional ya que se puede obtener información de muestras sólidas y líquidas sin ningún tratamiento previo de las mismas y con una instrumentación muy sencilla.

* només en el cas de què algun dels tutors no complisca els requisits per a ser tutor acadèmic



TEMA TREBALL FI DE GRAU GRAU EN QUÍMICA

TUTOR/A ACADÈMIC/A: Carmen Ramírez de Arellano Sánchez / Emilio Escrivá Montó

TUTOR/A del TREBALL (si escau)*: Carmen Ramírez de Arellano Sánchez / Emilio Escrivá Mo

TUTOR/A EXTERN/A (si escau):

TÍTOL

Interacciones no convencionales en la formación de materiales supramoleculares de compuestos de metales de transición con ligandos N-heterocíclicos.

OBJECTIUS

- Diseñar, sintetizar y cristalizar materiales metalorgánicos supramoleculares mediante el uso de ligandos N-heterocíclicos y metales de transición.
- Determinar la estructura por difracción de rayos X y estudiar las interacciones y su influencia en el ensamblaje supramolecular.
- Relacionar las propiedades espectroscópicas y magnéticas con las estructuras encontradas.

METODOLOGIA

- Iniciación teórico/práctica a los procesos de síntesis y cristalización de sistemas metal-orgánicos.
- Introducción teórico/práctica a la determinación estructural utilizando la difracción de rayos X de monocristal: aislamiento y tratamiento de cristales, uso del difractómetro, conocimientos sobre diversos programas para el tratamiento de datos y estudio de interacciones y ensamblajes supramoleculares.
- 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 a la caracterización espectroscópica y magnética de los sistemas caracterizados.



* només en el cas de què algun dels tutors no complisca els requisits per a ser tutor acadèmic

TEMA TREBALL FI DE GRAU
GRAU EN QUÍMICA

TUTOR/A ACADÈMIC/A: María Sánchez Roselló

TUTOR/A del TREBALL (si escau)*: _____

TUTOR/A EXTERN/A (si escau): _____

TÍTOL

NUEVAS METODOLOGÍAS DE SÍNTESIS DEL ESQUELETO DE AZAFENALENO

OBJECTIUS

En el presente trabajo se evaluará una nueva metodología basada en reacciones de metátesis que permita acceder al esqueleto de azafenaleno, presente en una gran variedad de alcaloides de origen natural

METODOLOGIA

Mediante el empleo de reacciones de metátesis cruzada y metátesis con cierre de anillo nos proponemos acceder a sustratos que mediante procesos de transanulación permitan generar el esqueleto de azafenaleno de forma enantioméricamente enriquecida. Este esqueleto está presente en una gran variedad de alcaloides como la hipodamina.



* només en el cas de què algun dels tutors no complisca els requisits per a ser tutor acadèmic

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

TUTOR/A ACADÈMIC/A: Juan Francisco Sanz Cervera

TUTOR/A del TREBALL (si escau)*:

TUTOR/A EXTERN/A (si escau): Juan Francisco Sanz Cervera

TÍTOL

La artemisinina y sus derivados, los principales fármacos antimaláricos: métodos de síntesis, semisíntesis y aprovechamiento de los metabolitos relacionados.

OBJECTIUS

El proyecto de TFG tiene dos objetivos. El primero es la localización y estudio de diversas fuentes bibliográficas relacionadas con el tratamiento de la malaria con artemisinina y derivados sintéticos. El segundo se centra en sus métodos de síntesis, semisíntesis y aprovechamiento y reciclaje de materiales estructuralmente relacionados con la artemisinina, con el objetivo de aumentar su producción.

METODOLOGIA

El estudiante obtendrá información mediante una búsqueda bibliográfica y desarrollará un trabajo que incluya los aspectos más importantes de los objetivos indicados por escrito, todo ello bajo la tutela y dirección del tutor del TFG.



* només en el cas de què algun dels tutors no complisca els requisits per a ser tutor acadèmic

TEMA TREBALL FI DE GRAU
GRAU EN QUÍMICA

TUTOR/A ACADÈMIC/A: Antonio Simón Fuentes

TUTOR/A del TREBALL (si escau)*:

TUTOR/A EXTERN/A (si escau):

TÍTOL

Reacciones de Fluoración en etapas tardías

OBJECTIUS

Realizar una búsqueda bibliográfica sobre fluoración de moléculas orgánicas en estadios avanzados de la síntesis de compuestos fluorados. Análisis crítico de la conveniencia de llevar a cabo estos procesos en lugar de utilizar building-blocks fluorados como compuestos de partida.

METODOLOGIA

Trabajo bibliográfico sobre métodos de fluoración de compuestos en etapas intermedias o finales de síntesis.



* només en el cas de què algun dels tutors no complisca els requisits per a ser tutor acadèmic

TEMA TREBALL FI DE GRAU
GRAU EN QUÍMICA

TUTOR/A ACADEMIC/A: SALAH-EDDINE STIRIBA

TUTOR/A del TREBALL (si escau)*:

TUTOR/A EXTERN/A (si escau):

TÍTOL

Síntesis Orgánica en Estado Sólido: Preparación Sostenible y Eficaz de Bases de Schiff tipo "Salen"

OBJECTIUS

Síntesis de varios ligandos del tipo salen [dianión N,N'-bis(salicilideno)etilendiamina] y derivados en ausencia de disolventes.

Puesta a punto de las condiciones más sostenibles para alcanzar un proceso eficaz y con porcentajes elevados de eficiencia atómica "atom economy".

METODOLOGIA

El alcance de los objetivos arriba mencionados se abordará mediante la preparación de una familia de ligandos tipo "salen" a partir de los reactivos adecuados en ausencia de disolvente, modificando las variables de las reacciones (temperatura, tiempo, relaciones molares, etc...).

Los productos orgánicos obtenidos serán caracterizados mediante espectrometría de masas y espectroscopía de RMN y FT-IR.



* només en el cas de què algun dels tutors no complisca els requisits per a ser tutor acadèmic

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

TUTOR/A ACADÈMIC/A: SALAH-EDDINE STIRIBA

TUTOR/A del TREBALL (si escau)*:

TUTOR/A EXTERN/A (si escau):

TÍTOL

Síntesis y Caracterización de Ligandos No-Inocentes y de sus Complejos de Paladio(II) y Cobre(II) con Propiedades Catalíticas

OBJECTIUS

Diseño y preparación de varios ligandos no-inocentes (LNI) con propiedades rédox y/o fotoactivas.

Síntesis y caracterización de sus complejos de paladio(II) y cobre(II) y su aplicación en procesos catalíticos orgánicos.

METODOLOGIA

Los objetivos arriba mencionados se realizarán a través de:

- i) síntesis y caracterización de una familia de ligandos no-inocentes (LNI) con propiedades rédox, fotoactivas o ópticas;
- ii) estudio de la coordinación de los LNI a metales de transición (Pd y Cu) con propiedades catalíticas que requieren un control preciso del estado de oxidación del centro metálico;
- iii) caracterización de los complejos obtenidos mediante espectroscopía multidimensional de RMN, FT-IR y cristalografía de rayos-X sobre monocristal;
- iv) aplicación catalítica de los complejos obtenidos en procesos orgánicos sostenibles de formación de enlaces carbono-carbono y carbono-nitrógeno.

* només en el cas de què algun dels tutors no complisca els requisits per a ser tutor acadèmic



TEMA TREBALL FI DE GRAU GRAU EN QUÍMICA

TUTOR/A ACADÈMIC/A: MARÍA TERESA VAREA MUÑOZ

TUTOR/A del TREBALL (si escau)*:

TUTOR/A EXTERN/A (si escau):

TÍTOL

Quiralidad y bioactividad. Análisis de los métodos de síntesis de fármacos sintéticos quirales no racémicos introducidos en terapéutica en los últimos años.

OBJECTIUS

Se pretende que el estudiante amplíe sus conocimientos acerca de la síntesis industrial de fármacos enantioméricamente puros y comprenda las razones que conducen a que los compuestos orgánicos quirales puedan presentar diferencias importantes en su actividad biológica.

Se trata de un TFG de carácter BIBLIOGRÁFICO en el que el estudiante pondrá en práctica sus habilidades en la búsqueda de información y en la gestión y presentación de los contenidos seleccionados, así como los conocimientos adquiridos sobre síntesis de compuestos quirales.

METODOLOGIA

- Búsqueda de información sobre el tema propuesto a través de las diferentes herramientas que ofrece la Universitat de València, incluyendo fuentes primarias.
- Gestión de la información para realizar una selección adecuada de contenidos que serán recogidos en la correspondiente memoria.
- Análisis desde diferentes puntos de vista (mecanismo de las reacciones implicadas, riesgos derivados del uso de reactivos y disolventes, etc...) de las rutas de síntesis seleccionadas.



* només en el cas de què algun dels tutors no complisca els requisits per a ser tutor acadèmic