

**TEMAS PENDIENTES DE INSCRIBIR**  
**DEPARTAMENT DE QUÍMICA ORGÀNICA**

<b>NÚMERO</b>	<b>TEMA</b>	<b>TUTOR(S) ACADÈMIC(S)</b>	<b>TOR EXTERN (si esca</b>
1	Preparación de nuevos fluoróforos heterocíclicos basados en BODIPYs.	José Antonio Sáez Cases	
2	Utilización de compuestos carbonílicos alfa,beta-insaturados con sustituyentes sililados en posición beta en catálisis asimétrica.	Isabel Fernández Picot Carlos Vila Descals	
6	Ligandos tripodales para catalizadores heterogéneos de cobalto (II) y hierro (II).	Andrea Olmos Vergé Carmen Ramírez de Arellano Sánchez	
8	Nuevos ligandos bi y tridentados derivados de trazol para el diseño de catalizadores con metales de transición.	Andrea Olmos Vergé Carmen Ramírez de Arellano Sánchez	
9	Síntesis de un sensor para la detección simultánea de CO y NO <sub>2</sub> .	Ana María Costero Nieto	
11	Preparación de sensores, basados en BODIPYs con aceptores Michael, para la detección de benzodiazepinas.	Margarita Parra Álvarez	
12	Estudio de los procesos de reducción de catinonas y ketamina.	Salvador Gil Grau	
16	Síntesis de la cianotoxina dihidroanatoxina-a.	Antonio Abad Somovilla	
17	Síntesis de la cianotoxina dihidrohomoanatoxina-a.	Consuelo Agulló Blanes	
18	Plaguicidas, clasificación, uso y presencia de estos residuos en el medioambiente y en la alimentación. Sus efectos.	Amparo Asensio	
19	La industria del plástico. Microplásticos. Presencia de residuos en la vida diaria.	Amparo Asensio	
20	Síntesis y caracterización de luminóforos basados en complejos metálicos	Julia Pérez Prieto Delia Bellezza	
21	Síntesis enantioselectiva de ácidos sulfónicos mediante adición de bisulfito sódico a aza-dienos fusionados	Amparo Sanz Marco	
23	Moduladores en la síntesis de MOFs	Rafael Ballesteros Garrido	
26	Estudio computacional de reacciones de cicloadición mediante análisis de distorsión/interacción	Jorge Escorihuela Fuentes	
27	Diseño de nuevos reactivos con reactividad mejorada en reacciones de cicloadición de tipo "click chemistry"	Jorge Escorihuela Fuentes	
28	Caracterización de Complejos Moleculares de Transferencia de densidad electrónica	Luis R. Domingo M. José Aurell	
29	Caracterización teórica de los puentes de hidrógeno dentro de la mecánica cuántica	Luis R. Domingo M. José Aurell	
30	Reacciones de cicloadición enantioselectivas con vinílogos de isocianoacetatos	Gonzalo Blay Llinares	
31	Reacciones de arilación enantioselectiva en $\alpha$ a grupo carbonilo con orto-quinonadiimidias	M. Luz Cardona Prosper	
32	Síntesis de sistemas 1,4 diénicos a partir de alcoholes gamma-delta insaturados mediante reacciones de eliminación.	Ismael Navarro Fuertes	
33	Catalizadores de cobre (I) anclados a líquidos iónicos: Aplicaciones como catalizadores sostenibles en ciclaciones de tipo "click"	Salah Eddine Stiriba	
34	Síntesis sostenible de amidas vía M@líquidos iónicos (M=Cu, Pd)	Salah Eddine Stiriba	
35	Empleo de catalizadores organometálicos en la síntesis de los nuevos fármacos	María Teresa Varea Muñoz	
36	Moléculas orgánicas fotoisomerizables	María González Béjar	
	Diseño, síntesis y evaluación de sensores cromo/fluorogénicos para la detección de GHL	Parra Álvarez, Margarita	

TEMA TREBALL FI DE GRAU  
GRAU EN QUÍMICA

TUTOR/A ACADÈMIC/A: Jose Antonio Sáez Cases

TUTOR/A ACADÈMIC/A (si escau): --

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

TÍTOL

Preparación de nuevos fluoróforos heterocíclicos basados en BODIPYs

OBJECTIUS

El objetivo de este Trabajo Final de Grado es la síntesis, modificación y evaluación de la actividad como quimiosímetros de nuevos fluoróforos heterocíclicos basados en BODIPYs.

METODOLOGIA

Los BODIPYs son unos de los fluoróforos más versátiles dentro de los sensores moleculares gracias a sus excepcionales propiedades ópticas. Partiendo de un sistema ya sintetizado en nuestro grupo de investigación con dos triples enlaces conjugados con dos sistemas BODIPY terminales que ha demostrado ser sensible a cationes metálicos y a simulantes de agentes nerviosos, se sintetizará un derivado heterocíclico que permitirá ampliar sus capacidades como quimiosensor.

La propuesta metodológica para este Trabajo Final de Grado se basa en los siguientes puntos:

- 1.- La síntesis del nuevo fluoróforo heterocíclico basado en BODIPY basándose en reacciones descritas en la bibliografía y en la experiencia del grupo de investigación en este tipo de compuestos.
- 2.- El estudio de las propiedades de absorción y emisión del nuevo fluoróforo en diferentes entornos y disolventes.
- 3.- El estudio de las propiedades como quimiosímetros de los fluoróforos sintetizados frente a diferentes especies: cationes metálicos, simulantes de agentes nerviosos, gases, pequeñas moléculas orgánicas, ...

(segell del Departament)



TEMA TREBALL FI DE GRAU  
GRAU EN QUÍMICA

TUTOR/A ACADÈMIC/A: Isabel Fernández Picot

TUTOR/A ACADÈMIC/A (si escau): Carlos Vila Descals

TUTOR/A EXTERN/A (si escau):

TÍTOL

Utilización de compuestos carbonílicos alfa,beta-unsaturados con sustituyentes sililados en posición beta en catálisis asimétrica

OBJECTIUS

El desarrollo de nuevos métodos de síntesis enantioselectiva constituye en la actualidad un área de intensa investigación. Entre estos, los procedimientos catalíticos (catálisis asimétrica) resultan especialmente atractivos ya que permiten minimizar el consumo de quiralidad y disminuir la producción de residuos. El objetivo de este trabajo es el estudio bibliográfico de los artículos donde se describan procesos catalíticos enantioselectivos en los que se utilicen compuestos carbonílicos alfa, beta-insaturados con sustituyentes sililados en posición beta.

METODOLOGIA

- 1) Búsqueda bibliográfica en diferentes fuentes como scifinder, web of knowledge, etc.
- 2) Cribado y selección de artículos.
- 3) Análisis de los diferentes sistemas catalíticos donde se utilicen este tipo de compuestos.
- 4) Búsqueda y análisis de las aplicaciones de estos sistemas catalíticos



(segell del Departament)

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

**TUTOR/A ACADÈMIC/A:** Andrea Olmos Vergé y Carmen Ramírez de Arellano Sánchez

**TUTOR/A ACADÈMIC/A (si escau):**

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

**TÍTOL**

Ligandos tripodales para catalizadores heterogéneos de cobalto (II) y hierro (II).

**OBJECTIUS**

- Síntetizar y caracterizar potenciales catalizadores de Co(II) y Fe(II) con ligandos tripodales derivados de pirazol y triazol.
- Determinar la estructura cristalina por difracción de rayos X y estudiar las posibles conformaciones, interacciones y el empaquetamiento cristalino.
- Estudiar la reactividad de los nuevos complejos.

**METODOLOGIA**

- Iniciación teórico/práctica a los procesos de síntesis de los ligandos orgánicos necesarios.
  - Iniciación teórico práctica a los procesos de preparación de complejos metálicos en condiciones inertes (uso de línea Schlenk y caja seca) y cristalización de sistemas metalo-orgánicos.
  - 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 difractómetro, 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 a la caracterización espectroscópica y magnética de los sistemas caracterizados.



(segell del Departament)

TEMA TREBALL FI DE GRAU  
GRAU EN QUÍMICA

TUTOR/A ACADÈMIC/A: Andrea Olmos Vergé y Carmen Ramírez de Arellano Sánchez

TUTOR/A ACADÈMIC/A (si escau):

TUTOR/A EXTERN/A (si escau):

TÍTOL

Nuevos ligandos bi y tridentados derivados de triazol para el diseño de catalizadores con metales de transición.

OBJECTIUS

- Síntetizar y caracterizar ligandos bi y tripodales derivados de triazol.
- Determinar la estructura cristalina por difracción de rayos X y estudiar las posibles conformaciones, interacciones y el empaquetamiento cristalino.
- Estudiar la reactividad de los nuevos ligandos.

METODOLOGIA

- Iniciación teórico/práctica a los procesos de síntesis de los ligandos orgánicos necesarios.
- Iniciación teórico práctica a los procesos de preparación de complejos metálicos en condiciones inertes (uso de línea Schlenk y caja seca) y cristalización de sistemas metalo-orgánicos.
- 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 difractómetro, 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 a la caracterización espectroscópica y magnética de los sistemas caracterizados.



(segell del Departament)

TEMA TREBALL FI DE GRAU  
GRAU EN QUÍMICA

TUTOR/A ACADÈMIC/A: Ana M. Costero Nieto

TUTOR/A ACADÈMIC/A (si escau):

TUTOR/A EXTERN/A (si escau):

TÍTOL

Síntesis de un sensor para la detección simultánea de CO y NO<sub>2</sub>

OBJECTIUS

Preparar un sensor capaz de reconocer simultáneamente monóxido de carbono y dióxido de nitrógeno

METODOLOGIA

Para la síntesis del sensor se hará uso de la metodología característica de la Química Orgánica y la Química Organometálica. La caracterización y pureza de los compuestos preparados se realizará mediante el empleo de distintas técnicas espectroscópicas. La capacidad sensora del compuesto preparado se evaluará mediante espectroscopía de fluorescencia.



(segell del Departament)

TEMA TREBALL FI DE GRAU  
GRAU EN QUÍMICA

TUTOR/A ACADÈMIC/A: Margarita Parra Alvarez

TUTOR/A ACADÈMIC/A (si escau):

TUTOR/A EXTERN/A (si escau):

TÍTOL

Preparación de sensores, basados en BODIPYs con aceptores Michael, para la detección de benzodiazepinas

OBJECTIUS

- Diseño y síntesis de quimiosensores basados en BODIPYs, con grupos aceptores de Michael
- Evaluación de su capacidad sensora

METODOLOGIA

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, haciendo uso de 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. Se determinarán los límites de detección y los posibles interferentes.



TEMA TREBALL FI DE GRAU  
GRAU EN QUÍMICA

TUTOR/A ACADÈMIC/A: Salvador Gil Grau

TUTOR/A ACADÈMIC/A (si escau):

TUTOR/A EXTERN/A (si escau):

TÍTOL

Estudio de los procesos de reducción de catinonas y ketamina

OBJECTIUS

Explorar métodos de reducción de Catinonas y ketamina para una posterior detección de estas drogas mediante los productos de reducción.

METODOLOGIA

Se someterá a muestras de ketamina y catinona a diferentes procesos de reducción, principalmente enzimática.

Se analizará los productos obtenidos, tiempos de reacción y selectividad de la reacción.

Se valorará si los productos obtenidos son susceptibles de detección mediante sensores colorimétricos.



(segell del Departament)

TEMA TREBALL FI DE GRAU  
 GRAU EN QUÍMICA

TUTOR/A ACADÈMIC/A: Antonio Abad Somovilla

TUTOR/A ACADÈMIC/A (si escau):

TUTOR/A EXTERN/A (si escau):

TÍTOL

Síntesis de la cianotoxina dihidroanatoxina-a

OBJECTIUS

La dihidroanatoxina-a es una potente neurotoxina natural estructuralment relacionada con la també cianotoxina anatoxina-a. Ambas son produïdes por diferents gèneros de cianobacterias en aigües de rius y lagos, cuya contaminació por las mismas resulta en un grave peligro para la salud de los potenciales consumidores, motivo por el cual resulta fundamental disponer de métodos analíticos adecuados para su determinación y cuantificación en las aguas de consumo, tanto por humanos como animales.

En el contexto de un proyecto dirigido al desarrollo de métodos inmunoanalíticos para la determinación analítica de dihidroanatoxina-a, se requiere disponer de la misma para su utilización como estándar analítico. El presente proyecto tiene como objetivo la preparación por síntesis total de esta cianotoxina.

La dihidroanatoxina-a existe en la naturaleza como una mezcla de diastereoisómeros cis-trans, en este proyecto se preparará la mezcla de ambos diastereoisómeros a partir de 1,5-ciclooctadieno a través de una ruta sintética de 6 etapas y se evaluará la posible separación por métodos cromatográficos de ambos diastereoisómeros para poder disponer de forma independiente de los mismos como referencia analítica.

METODOLOGIA

- 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); 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 productos y conjugados por técnicas espectroscópicas mono y bidimensionales de RMN, espectrometría de masas, MALDI-TOF-MS, etc.
- e) Discusión de los resultados alcanzados.
- g) Elaboración de la memoria y preparación de la presentación pública



(segell del Departament)

TEMA TREBALL FI DE GRAU  
 GRAU EN QUÍMICA

TUTOR/A ACADÈMIC/A: Consuelo Agulló Blanes

TUTOR/A ACADÈMIC/A (si escau):

TUTOR/A EXTERN/A (si escau):

TÍTOL

Síntesis de la cianotoxina dihidrohomoanatoxina-a

OBJECTIUS

La dihidrohomoanatoxina-a es una potente neurotoxina natural estructuralment relacionada con la també cianotoxinas anatoxina-a y dihidroanatoxina-a. Todas ellas son producidas por diferentes géneros de cianobacterias en aguas de ríos y lagos, cuya contaminación por las mismas resulta en un grave peligro para la salud de los potenciales consumidores, motivo por el cual resulta fundamental disponer de métodos analíticos adecuados para su determinación y cuantificación en las aguas de consumo, tanto humano como animal.

En el contexto de un proyecto dirigido al desarrollo de métodos inmunoanalíticos para la determinación analítica de dihidrohomoanatoxina-a, se requiere disponer de la misma para su utilización como estándar analítico. El presente proyecto tiene como objetivo la preparación por síntesis total de esta cianotoxina.

Al igual que la dihidroanatoxina-a, la dihidroanatoxina-a existe en la naturaleza como una mezcla de diastereoisómeros cis-trans, en este proyecto se preparará la mezcla de ambos diastereoisómeros a partir de 1,5-ciclooctadieno a través de una ruta sintética de 6 etapas y se evaluará la posible separación por métodos cromatográficos de ambos diastereoisómeros para poder disponer de forma independiente de los mismos como referencia analítica.

METODOLOGIA

- 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); 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.
- e) Discusión de los resultados alcanzados.
- g) Elaboración de la memoria y preparación de la presentación pública



(segell del Departament)

TEMA TREBALL FI DE GRAU  
GRAU EN QUÍMICA

TUTOR/A ACADÈMIC/A: AMPARO ASENSIO MARTINEZ

TUTOR/A ACADÈMIC/A (si escau):

TUTOR/A EXTERN/A (si escau):

TÍTOL

PLAGUICIDAS. CLASIFICACIÓN, USO Y PRESENCIA DE ESTOS RESIDUOS EN EL MEDIOAMBIENTE Y EN LA ALIMENTACIÓN. SUS EFECTOS.

OBJECTIUS

Una revisió bibliogràfica sobre los plaguicidas, su clasificaci3n y el uso mas frecuente. La regulaci3n progresiva de su utilizaci3n. Alternativas de su empleo y los efectos sobre la salud y el medio ambiente.

METODOLOGIA

Revisió bibliogràfica. Utilizaci3n de bases de datos (Scifinder) y fuentes electr3nicas disponibles en la Universitat. Monografías y artículos recientes publicados sobre el tema.



TEMA TREBALL FI DE GRAU  
GRAU EN QUÍMICA

TUTOR/A ACADÈMIC/A: AMPARO ASENSIO MARTINEZ

TUTOR/A ACADÈMIC/A (si escau):

TUTOR/A EXTERN/A (si escau):

TÍTOL

LA INDUSTRIA DEL PLÀSTICO. MICROPLASTICOS. PRESENCIA DE RESIDUOS EN LA VIDA DIARIA.

OBJECTIUS

Un estudio centrado en los plásticos actuales, contaminación creciente del medio ambiente, los microplásticos y su presencia en la alimentación, la cosmética y demás productos de cuidado personal. Alternativas para frenar este deterioro medio ambiental.

METODOLOGIA

Revisión bibliográfica. Utilización de bases de datos (Scifinder) y fuentes electrónicas disponibles en la Universitat. Monografías y artículos recientes publicados sobre el tema.



(segell del Departament)

TEMA TREBALL FI DE GRAU  
GRAU EN QUÍMICA

TUTOR/A ACADÈMIC/A: Julia Pérez Prieto

TUTOR/A ACADÈMIC/A (si escau): Delia Bellezza

TUTOR/A EXTERN/A (si escau):

TÍTOL

Síntesis y caracterización de luminóforos basados en complejos metálicos.

OBJECTIUS

Sintetizar complejos metálicos con compuestos orgánicos como ligandos y estudiar su versatilidad como luminóforos.

METODOLOGIA

Se realizará la síntesis de complejos metálicos basados en metales luminescentes y cromóforos orgánicos utilizando metodología desarrollada recientemente en el grupo de investigación. Los materiales serán caracterizados utilizando diferentes técnicas espectroscópicas de estado estacionario y resolución temporal. Complejos análogos de metales no luminescentes serán utilizados como control.



(segell del Departament)

## TEMA TREBALL FI DE GRAU GRAU EN QUÍMICA

TUTOR/A ACADÈMIC/A: Amparo Sanz Marco

TUTOR/A ACADÈMIC/A (si escau): \_\_\_\_\_

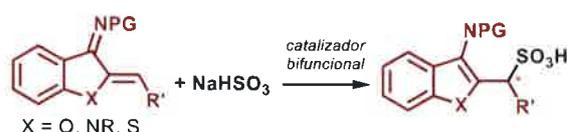
TUTOR/A EXTERN/A (si escau): \_\_\_\_\_

### TÍTOL

Síntesis enantioselectiva de ácidos sulfónicos mediante adición de bisulfito sódico a aza-dienos fusionados

### OBJECTIUS

- Síntesis de aza-dienos fusionados con sistemas de benzofurano, benzotiofeno o benzopirrol
- Desarrollo de la reacción de adición enantioselectiva de bisulfito sódico a aza-dienos fusionados.
- Modificación de los productos de reacción obtenidos



### METODOLOGIA

- La metodología se basa en el uso de organocatalizadores quirales con estructura de escuaramida o tiourea que actúan mediante la formación de puentes de hidrógeno.
- Se sintetizarán aza-dienos fusionados con sistemas de benzofurano, benzotiofeno o pirrol y se estudiará la adición nucleofílica de bisulfito sódico a estos compuestos en condiciones de catálisis bifuncional. Los productos se caracterizarán mediante técnicas espectroscópicas y su relación enantiomérica se medirá mediante cromatografía HPLC.

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.)



(segell del Departament)

TEMA TREBALL FI DE GRAU  
GRAU EN QUÍMICA

TUTOR/A ACADÈMIC/A: Rafael Ballesteros Garrido

TUTOR/A ACADÈMIC/A (si escau):

TUTOR/A EXTERN/A (si escau):

TÍTOL

Moduladores en la síntesis de MOFs

OBJECTIUS

Estudiar el efecto en el tamaño al usar moduladores en la síntesis de MOF-10  
Estudiar el efecto de los moduladores en el grado de interpenetración

METODOLOGIA

Caracterización de materiales  
Síntesis hidrotermal



(segell del Departament)

TEMA TREBALL FI DE GRAU  
GRAU EN QUÍMICA

TUTOR/A ACADÈMIC/A: Jorge Escorihuela Fuentes

TUTOR/A ACADÈMIC/A (si escau):

TUTOR/A EXTERN/A (si escau):

TÍTOL

Estudio computacional de reacciones de cicloadición mediante análisis de distorsión/interacción.

OBJECTIUS

Los objetivos de este Trabajo de Fin de Final de Grado en Química son el estudio computacional de reacciones de cicloadición de tipo click mediante calculos teóricos basados en metodología DFT en combinación con un análisis de distorsión/interacción para seleccionar sistemas con elevadas velocidades de reacción.

METODOLOGIA

La metodología de este Trabajo de Fin de Final de Grado en Química consistirá en un trabajo de búsqueda bibliográfica de compuestos orgánicos con sistemas cíclicos tensionados (trans-cicloocteno y derivados) en las diferentes bases de datos (SciFinder) en combinación con el uso de herramientas de Química Computacional (Gaussian, Gaussview, Spartan) para la modelización de moléculas orgánicas cíclicas y el estudio de las mismas en reacciones de química click como las reacciones SPAAC (Strain-promoted alkyne-azide cycloadditions), SPOCQ (Strain-Promoted Oxidation-Controlled Cyclooctyne-1,2-Quinone Cycloaddition) y IEDDA (Inverse electron-demand Diels-Alder reaction).

Para ejemplos similares ver: J. Org. Chem. 2018, 83, 244-252 y J. Org. Chem. 2018, 83, 244-252).



(segell del Departament)

TEMA TREBALL FI DE GRAU  
GRAU EN QUÍMICA

TUTOR/A ACADÈMIC/A: Jorge Escorihuela Fuentes

TUTOR/A ACADÈMIC/A (si escau):

TUTOR/A EXTERN/A (si escau):

TÍTOL

Diseño de nuevos reactivos con reactividad mejorada en reacciones de cicloadición de tipo "click chemistry".

OBJECTIUS

Los objetivos de este Trabajo de Fin de Final de Grado en Química son la síntesis de nuevos reactivos tensionados o modificados con átomos de flúor con una reactividad mejorada en reacciones de cicloadición de tipo "click chemistry" y su posterior evaluación en este tipo de reacciones. Los nuevos reactivos se ensayaran en diversas reacciones de química click como las reacciones SPAAC (Strain-promoted alkyne-azide cycloadditions), SPOCQ (Strain-Promoted Oxidation-Controlled Cyclooctyne-1,2-Quinone Cycloaddition) y IEDDA (Inverse electron-demand Diels-Alder reaction).

METODOLOGIA

La metodología del Trabajo de Fin de Final de Grado en Química consistirá en trabajo experimental de laboratorio en el que el alumno/a se familiarizará con las técnicas experimentales para la síntesis de los compuestos orgánicos que se desea estudiar y las técnicas de caracterización habituales en Química Orgánica, tales como resonancia magnética nuclear de protón ( $^1\text{H}$  RMN) y de carbono ( $^{13}\text{C}$  RMN), espectrometría de masas, determinación de puntos de fusión, polarimetría, etc.



(segell del Departament)

TEMA TREBALL FI DE GRAU  
GRAU EN QUÍMICA

TUTOR/A ACADÈMIC/A: Luis R.Domingo

TUTOR/A ACADÈMIC/A (si escau): M. José Aurell

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 (MEDT) sobre las características de los complejos moleculares de transferencia de densidad electrónica, conocidos como complejos de transferencia de carga, de gran interés tanto por sus 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.



(segell del Departament)

TEMA TREBALL FI DE GRAU  
GRAU EN QUÍMICA

TUTORIA ACADÈMIC/A: Luis R. Domingo

TUTORIA ACADÈMIC/A (si escau): M. José Aurell

TUTORIA EXTERN/A (si escau): \_\_\_\_\_

TÍTOL

Caracterización teórica de los puentes de hidrógeno dentro de la mecánica cuántica

OBJECTIUS

Los puentes de hidrógeno juegan un papel relevante tanto en la química orgánica como en la bioquímica. Dentro de la mecánica cuántica se han establecido diversos criterios para caracterizar los puentes de hidrógenos entre moléculas.

En el presente TFG se llevará a cabo una búsqueda bibliográfica de los criterios utilizados para su caracterización, y posteriormente se llevará a cabo un ejercicio práctico sobre la caracterización de los mismos.

METODOLOGIA

Junto al aprendizaje de la búsqueda bibliográfica de las técnicas utilizadas para la caracterización de los puentes de hidrógeno dentro de la mecánica cuántica, el alumno se familiarizará con el uso del paquete de cálculo Gaussian para la optimización geométrica de moléculas orgánicas, así como en el uso de los métodos utilizados para la caracterización de los puentes de hidrógeno descritos en la bibliografía.



(segell del Departament)

## TEMA TREBALL FI DE GRAU GRAU EN QUÍMICA

TUTOR/A ACADÈMIC/A: Gonzalo Blay Llinares

TUTOR/A ACADÈMIC/A (si escau): \_\_\_\_\_

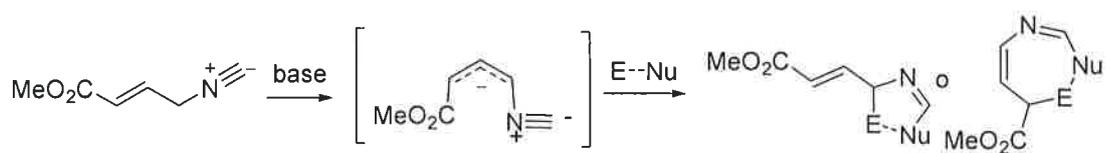
TUTOR/A EXTERN/A (si escau): \_\_\_\_\_

### TÍTOL

Reacciones de cicloadición enantioselectivas con vinílogos de isocianoacetatos

### OBJECTIUS

- Síntesis de ésteres del ácido 4-isociano-2-butenoico para ser utilizados como 1,2- o 1,5-dipolos.
- Estudio de reacciones de cicloadición formal de ésteres del ácido 4-isociano-2-butenoico con diversos dipolarófilos. Exploración para el desarrollo de un procedimiento catalítico enantioselectivo.



### METODOLOGIA

- La metodología se basa en el uso de organocatalizadores quirales con estructura de escuaramida o tiourea que actúan mediante la formación de puentes de hidrógeno.
- Se desarrollará una síntesis para el 4-isociano-2-butenoato de metilo y se estudiará su reacción con compuestos insaturado (aldehídos, alquenos). Los productos se caracterizarán mediante técnicas espectroscópicas y su relación enantiomérica se medirá mediante cromatografía HPLC. 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.)



(segell del Departament)

## TEMA TREBALL FI DE GRAU GRAU EN QUÍMICA

TUTOR/A ACADÈMIC/A: M<sup>a</sup> Luz Cardona Prosper

TUTOR/A ACADÈMIC/A (si escau):

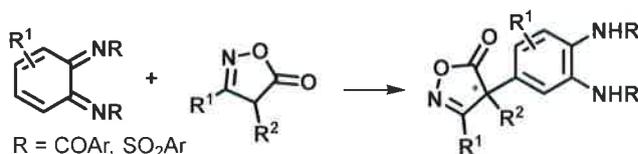
TUTOR/A EXTERN/A (si escau):

### TÍTOL

Reacciones de arilación enantioselectiva en  $\alpha$  a grupo carbonilo con *orto*-quinonadiimidias

### OBJECTIUS

- Estudio de la reacción entre compuestos carbonílicos y *orto*-quinonadiimidias para la síntesis de compuestos  $\alpha$ -aril carbonílicos y desarrollo de un procedimiento catalítico enantioselectivo para la misma



### METODOLOGIA

- La metodología se basa en el uso de organocatalizadores quirales con estructura de escuaramida o tiourea que actúan mediante la formación de puentes de hidrógeno.
- Se prepararán *orto*-quinonadiimidias por oxidación de bis-amidas de 1,2-diaminobenceno y se estudiará su reacción con compuestos carbonílicos tales como isocianoacetatos y isoxazol-5-onas para dar los correspondientes compuestos arilados quirales. Los productos se caracterizarán mediante técnicas espectroscópicas y su relación enantiomérica se medirá mediante cromatografía HPLC.

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

TUTOR/A ACADÈMIC/A: Ismael Navarro Fuertes

TUTOR/A ACADÈMIC/A (si escau): \_\_\_\_\_

TUTOR/A EXTERN/A (si escau): \_\_\_\_\_

TÍTOL

Síntesis de sistemas 1,4 diénicos a partir de alcoholes gamma-delta insaturados mediante reacciones de eliminación.

OBJECTIUS

El objetivo del trabajo es el estudio de las condiciones reacción para la formación de sistemas 1,4 diénicos a partir de alcoholes gamma-delta insaturados mediante reacciones de eliminación. Estas agrupaciones diénicas forman parte alguna feromona sexual de insectos que son plagas que afectan a cultivos de interés comercial. Este estudio comprende la síntesis de los derivados de los alcoholes o su transformación en halogenuros de alquilo así como la estudio de bases, disolventes y temperatura que conduzcan a los dienos objetivos con buenos rendimientos.

METODOLOGIA

La propuesta experimental parte del acetato de trans-necrodilo, el cual es un producto natural que puede obtenerse de los aceites esenciales de alguna especie de lavanda. Este monoterpeno puede convertirse en su correspondiente alcohol por desacetilación. Este alcohol será transformado en un derivado, e.g. mesilato, tosilato o bromuro, que sea susceptible de dar la reacción de eliminación que conduzca al correspondiente dieno. La metodología comprenderá:

- 1) Búsqueda bibliográfica y análisis de la más significativa.
- 2) Propuesta de las metodologías sintéticas más adecuada para alcanzar el objetivo.
- 3) Implementación de la secuencia sintética. Las técnicas a emplear comprenden:
  - 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 de RMN y espectrometría de masas.
- 4) Discusión de los resultados alcanzados y elaboración de la memoria para su presentación pública



(segell del Departament)

TEMA TREBALL FI DE GRAU  
GRAU EN QUÍMICA

TUTOR/A ACADÈMIC/A: SALAH EDDINE STIRIBA

TUTOR/A ACADÈMIC/A (si escau):

TUTOR/A EXTERN/A (si escau):

TÍTOL

Catalizadores de cobre(I) anclados a líquidos iónicos: Aplicaciones como catalizadores sostenibles en ciclaciones de tipo "click".

OBJECTIUS

En este proyecto se plantea la síntesis, caracterización de líquidos iónicos con ligandos coordinantes capaces de estabilizar complejos de cobre(I) y su aplicación en procesos de la química click de cicloadición [3+2] de azidas a alquinos, con el objetivo principal de desarrollar una química orgánica sostenible.

METODOLOGIA

El alcance de los objetivos específicos de este proyecto se abordará mediante el diseño y la síntesis de un nuevo líquido iónico funcionalizado con un ligando coordinante capaz de estabilizar cobre(I) como especie catalíticamente activa a partir de los reactivos adecuados.

El catalizador anclado al líquido iónico se aplicará en reacciones de química click, en particular la reacción de cicloadición [3+2] de azidas a alquinos (cicloadición de Huisgen).

Los catalizadores y productos orgánicos serán caracterizados mediante espectroscopía avanzada de RMN, FT-IR y XPS y espectrometría de masas de alta resolución.



(segell del Departament)

TEMA TREBALL FI DE GRAU  
GRAU EN QUÍMICA

TUTOR/A ACADÈMIC/A: SALAH EDDINE STIRIBA

TUTOR/A ACADÈMIC/A (si escau):

TUTOR/A EXTERN/A (si escau):

TÍTOL

Síntesis sostenible de amidas vía M@líquidos iónicos (M= Cu, Pd).

OBJECTIUS

En este proyecto se plantea la síntesis de la función vital "amida" mediante un proceso catalítico donde se emplean catalizadores de cobre y/o paladio anclados a líquidos iónicos, dentro del marco de la química orgánica avanzada en su faceta más sostenible.

METODOLOGIA

El alcance de los objetivos específicos de este proyecto se abordará mediante el diseño y síntesis de complejos de cobre y paladio anclados covalentemente a líquidos iónicos.

Los catalizadores heterogéneos obtenidos M@IL (M= Cu, Pd; IL= Ionic Liquid) se aplicarán para la preparación catalítica de amidas en condiciones sostenibles.

Los catalizadores y las amidas preparadas serán caracterizados mediante espectroscopia avanzada de RMN, FT-IR, XPS y espectrometría de masas de alta resolución.



(segell del Departament)

TEMA TREBALL FI DE GRAU  
 GRAU EN QUÍMICA

TUTOR/A ACADÈMIC/A: MARIA TERESA VAREA MUÑOZ

TUTOR/A ACADÈMIC/A (si escau):

TUTOR/A EXTERN/A (si escau):

TÍTOL

EMPLEO DE CATALIZADORES ORGANOMETÁLICOS EN LA SÍNTESIS DE NUEVOS FÁRMACOS.

OBJECTIUS

Se pretende que el/la estudiante:

- adquiera habilidades en el manejo de información bibliográfica en inglés,
- profundice en el concepto de catálisis y los diferentes tipos de catalizadores,
- analice qué catalizadores organometálicos han sido empleados en las síntesis de fármacos descritas en los últimos años y en qué tipos de reacción actúan

METODOLOGIA

El/la estudiante deberá preparar una introducción acerca de los temas relacionados con el título del TFG (catalizadores organometálicos, industria farmacéutica, síntesis industrial de fármacos,...).

Además, a partir de las revisiones que recogen las rutas de síntesis publicadas de los fármacos que se incorporan al mercado, deberá localizar en qué rutas se emplean los catalizadores organometálicos y analizar con detalle las reacciones en que intervienen.



(segell del Departament)

TEMA TREBALL FI DE GRAU  
 GRAU EN QUÍMICA

TUTOR/A ACADÈMIC/A: María González Béjar

TUTOR/A ACADÈMIC/A (si escau): \_\_\_\_\_

TUTOR/A EXTERN/A (si escau): \_\_\_\_\_

TÍTOL

Moléculas orgánicas fotoisomerizables.

OBJECTIUS

Principal: Realizar un trabajo de revisión bibliográfica sobre moléculas orgánicas fotoisomerizables.

Los objetivos específicos son:

1. Buscar información bibliográfica en bases de datos especializadas.
2. Clasificar la información obtenida.
3. Elaborar la memoria del TFG.
4. Preparar la exposición oral y su defensa delante de un tribunal.

METODOLOGIA

Se revisará el estado del arte del campo de conocimiento propuesto. Para ello, se elegirán las bases de datos especializadas más adecuadas. Seguidamente se establecerán los criterios de búsqueda más relevantes mediante selección de palabras clave y se establecerán las pautas más adecuadas para la consecución de los objetivos planteados. La mayor parte de la información se encuentra en artículos científicos y, por tanto, estará en inglés.

Tras la clasificación de la información obtenida se realizará una selección de los sistemas más interesantes y su importancia (por ejemplo, en el proceso de la visión o en preparación de materiales con respuesta a la iluminación). Además, se propondrán cuáles son las posibilidades de innovación en este campo de investigación.

Para la elaboración de la memoria del TFG se utilizará un gestor bibliográfico



(segell del Departament)

# VNIVERSITAT E VALÈNCIA ( Q ? ) Facultat de Química

## TEMA TREBALL FI DE GRAU GRAU EN QUÍMICA

**TUTOR/A ACADÈMIC/A:** Margarita Parra Alvarez

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

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

### TÍTOL

Diseño, síntesis y evaluación de sensores cromo/fluorogénicos para la detección de GHL

### OBJECTIUS

- Diseño y síntesis de quimiosensores para la detección de gamma-butirolactona o éxtasis líquido
- Evaluación de su capacidad sensora

### METODOLOGIA

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, sobre todo en muestras reales: bebidas alcohólicas y combinados. 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



(segell del Departament)