



UNIVERSIDAD DE JAÉN

Anexo II

TITULACIÓN: Grado en QUIMICA

MEMORIA INICIAL DEL TRABAJO FIN DE GRADO

CENTRO: Facultad de Ciencias Experimentales

CURSO ACADÉMICO: 2014-15



UNIVERSIDAD DE JAÉN

Facultad de Ciencias Experimentales

Título del Trabajo Fin de Grado:

SÍNTESIS DE NUEVOS ANTIFOLATOS CLÁSICOS.

1. DATOS BÁSICOS DE LA ASIGNATURA

NOMBRE: Trabajo Fin de Grado

CÓDIGO: 10316001

CARÁCTER: Obligatorio

Créditos ECTS: 15

CURSO: Cuarto

CUATRIMESTRE: Segundo

2. TUTOR/COTUTOR (en su caso)

Justo Cobo Domingo y Manuel Nogueras Montiel

3. VARIANTE Y TIPO DE TRABAJO FIN DE GRADO (Artículo 8 del Reglamento de los Trabajos Fin de Grado)

Específico: Experimental con revisión bibliográfica

4. COMPETENCIAS Y RESULTADOS DE APRENDIZAJE

Competencias transversales:

B1. Capacidad de análisis y síntesis.

B2. Capacidad de organización y planificación.

B3. Comunicación oral y escrita en la lengua nativa.

B4. Conocimiento de una lengua extranjera (preferiblemente inglés).

B5. Capacidad para la gestión de datos y la generación de información/ conocimiento mediante el uso de las nuevas tecnologías de información y comunicación.

B6. Resolución de problemas.

B7. Capacidad de adaptarse a nuevas situaciones y toma de decisiones.

B8. Trabajo en equipo.

B9. Razonamiento crítico.

B10. Capacidad de aprendizaje autónomo para el desarrollo continuo profesional.

B11. Sensibilidad hacia temas medioambientales.

B12. Compromiso ético.

B13. Iniciativa y espíritu emprendedor.

Competencias Generales:

P1. Habilidad para manipular con seguridad materiales químicos, teniendo en cuenta sus propiedades físicas y químicas, incluyendo cualquier peligro específico asociado con su uso.

P2. Habilidad para llevar a cabo procedimientos estándares de laboratorio implicados en trabajos analíticos y sintéticos, en relación con sistemas orgánicos e inorgánicos.

P3. Habilidad para la observación, seguimiento y medida de propiedades, eventos o cambios químicos, y el registro sistemático y fiable de la documentación correspondiente.

P4. Habilidad para manejar instrumentación química estándar, como la que se utiliza para



UNIVERSIDAD DE JAÉN

investigaciones estructurales y separaciones.

P5. Interpretación de datos procedentes de observaciones y medidas en el laboratorio en términos de su significación y de las teorías que la sustentan.

P6. Capacidad para realizar valoraciones de riesgos relativos al uso de sustancias químicas y procedimientos de laboratorio.

Q1. Capacidad para demostrar el conocimiento y comprensión de los hechos esenciales, conceptos, principios y teorías relacionadas con la Química.

Q2. Capacidad de aplicar dichos conocimientos a la resolución de problemas cualitativos y cuantitativos según modelos previamente desarrollados.

Q3. Competencia para evaluar, interpretar y sintetizar datos e información Química.

Q4. Capacidad para reconocer y llevar a cabo buenas prácticas en el trabajo científico.

Q5. Competencia para presentar, tanto en forma escrita como oral, material y argumentación científica a una audiencia especializada.

Q6. Destreza en el manejo y procesado informático de datos e información química

Competencias Específicas:

C13. Comprender las principales rutas sintéticas en química orgánica, incluyendo la interconversión de grupos funcionales y la formación de enlaces carbono-carbono y carbono heteroátomo.

Resultados de aprendizaje

311003D	Capacidad de integrar creativamente sus conocimientos para resolver un problema químico real.
311003E	Capacidad para estructurar una defensa sólida de los puntos de vista personales apoyándose en conocimientos científicos bien fundados.
311003F	Destreza en la elaboración de informes científicos complejos, bien estructurados y bien redactados.
311003G	Destreza en la presentación oral de un trabajo, utilizando los medios audiovisuales más habituales.

5. ANTECEDENTES

La pirimidina es un importante motivo heterocíclico estructural que está presente en un buen número de moléculas que juegan un papel importante en procesos fundamentales, siendo uno de los más importantes la síntesis de los ácidos nucleicos, aunque también se pueden citar vitaminas como la tiamina y riboflavina, o del ácido fólico, entre otros. Es de especial interés en este campo las 2-amino- y las 2,4-diaminopirimidinas, porque son farmacóforos reconocidos que se usan frecuentemente en el diseño de nuevos fármacos.

Las enzimas que catalizan todos los procesos en los que están involucrados los derivados de pirimidina, tanto anabólicos como catabólicos, son objetivos potenciales para el desarrollo de inhibidores, y por tanto dianas biológicas en el desarrollo de fármacos. En muchos casos estos



UNIVERSIDAD DE JAÉN

inhibidores son análogos de las pteridinas, purinas o pirimidinas de origen natural, en los que se ha producido una modificación en el patrón de sustitución en el heterociclo o en el sistema de anillo de heterocíclico correspondiente. La interrupción resultante en los procesos metabólicos primarios como consecuencia de la acción de estos agentes inhibidores permite su calificación como antimetabolitos, que se utilizan ampliamente para el control de las condiciones neoplásicas virales, parasitarias o fúngicas. También hay otros usos de antagonistas de purinas, por ejemplo, para el tratamiento de enfermedades de respuesta inmune, o un número considerable de derivados de pirimidina que no se expresan como antimetabolitos de los procesos antes mencionado, que son fármacos eficaces y bien conocidos, tales como los barbitúricos, y sulfonamidas determinados (sulfadiazina, sulfadimetoxina, etc).

Una de las estrategias que mayor eficacia ha tenido en el desarrollo de nuevos fármacos ha sido la búsqueda de agentes antifolatos, es decir aquellos que provocan la inhibición o modificación de la actividad de enzimas involucradas en la ruta biosintética de folatos como son la dihidrofolato reductasa (DHFR), Timidilato Sintasa, glicinamida ribonucleotido formiltransferasa,... Esta ruta biosintética es esencial en la síntesis de ADN y por consiguiente en la replicación celular. La principal aplicación de estos agentes antifolatos se debe a la inhibición de procesos proliferativos, como tumorales, virales, bacterianos, fúngicos,... al inhibir la replicación celular, siendo ésta más efectiva en aquellos procesos de gran "proliferación".

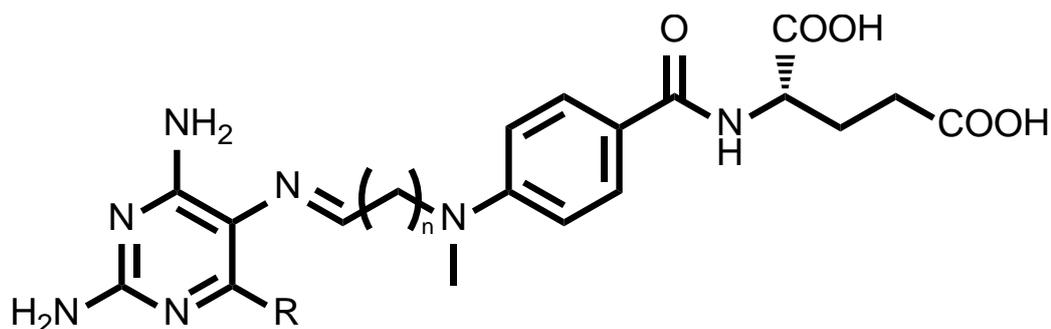
6. HIPÓTESIS DE TRABAJO

Una de las dianas biológicas más utilizadas en la búsqueda de agentes antiproliferativos es la DHFR, y en concreto búsqueda de nuevos derivados producto de modificaciones estructurales tomando como base el metotrexato (MTX), un potente anticancerígeno utilizado desde hace más de 50 años en el tratamiento de tumores sólidos. Así y utilizando como referencia este compuesto, análogo estructural del ácido fólico, se han desarrollado en los últimos años un buen número de patentes que tienen como base la preparación de nuevos derivados, modificando principalmente tanto el conector como el resto de glutamato, así como en algunos casos (aunque en menor medida) del anillo heterocíclico. Un gran avance que ha permitido abordar con una mayor posibilidad de éxito la búsqueda de nuevos inhibidores de DHFR ha sido el conocimiento sobre el sitio activo y la interacción enzima-inhibidor. A este respecto se plantea la síntesis de varios derivados en los que respecto MTX o ácido fólico, se ha modificado el anillo heterocíclico en que sólo hay un anillo de pirimidina en vez de pteridina, y en la que en el linker entre el anillo de pirimidina y el resto de aminobenzoilglutámico se incorpora un cadena carbonada al . Esto nos



UNIVERSIDAD DE JAÉN

permitiría conocer la influencia de la presencia o no de estos dos residuos, así como incorporar algún sustituyente R que permita modificar la capacidad de interacción del resto de 2-aminopirimidina con el resto polar de la enzima.



7. BREVE DESCRIPCIÓN DE LAS ACTIVIDADES A REALIZAR

- 1- Realizar una búsqueda bibliográfica sobre los avances realizados en el uso de antifolatos como fármacos potenciales en la última década.
- 2- Analizar la información bibliográfica y justificar la estructura propuesta
- 3- Realizar una búsqueda bibliográfica sobre estrategias de síntesis relacionadas con las moléculas a preparar.
- 4- Plantear una ruta retrosintética de las moléculas propuestas (R: H, NO₂, Cl) en base al punto 3
- 5- Realizar la síntesis en el laboratorio de al menos dos compuestos.
- 6- Realizar la caracterización estructural de los compuestos objetivo e intermedios.
- 7- Redacción del informe
- 8- Preparación y defensa de la exposición

8. DOCUMENTACIÓN/BIBLIOGRAFÍA

A recabar por el alumno, tomar como base

- Wright, D. L.; Anderson, A. C. "Antifolate agents: a patent review (2006 – 2010)" *Expert Opin. Ther. Patents*, **2011**, 21(9), 1293-1308.
- Tawari, N. R.; Bar, S.; Degami, M. S. "A Review of Molecular Modelling Studies of Dihydrofolate Reductase Inhibitors Against Opportunistic



UNIVERSIDAD DE JAÉN

Microorganisms and Comprehensive Evaluation of New Models” Current Pharmaceutical Design, **2011**, 17, 712-751.

- McGuire, J. J. "Anticancer Antifolates: Current Status and Future Directions" *Current Pharmaceutical Design*, **2003**, 9, 2593-2613.

9. CRONOGRAMA PROVISIONAL

el alumno se deberá de organizar y distribuir las diferentes tareas reflejadas en el apartado 7 durante el segundo cuatrimestre, de acuerdo a la siguiente temporización aproximada

- 20 horas: actividad 1

1 hora tutorización: asesoramiento sobre fuentes a consultar y extracción de conclusiones

- 20 horas: actividad 2

1 hora tutorización: orientación sobre como analizar los datos y revisión del análisis final realizado

- 15 horas: actividades 3 y 4

1 hora tutorización: el tutor dirigirá al estudiante sobre fuentes a consultar y utilidad de la información obtenida, así como de las propuestas de rutas de síntesis a seguir

- 220 horas en actividad 5 y 35 horas para la actividad 6

1 hora tutorización: El tutor guiará al estudiante en el proceso experimental, orientando en la búsqueda de soluciones ante problemas experimentales que puedan surgir.

- 50 horas: actividad 7

- 15 horas: actividad 8

1 hora tutorización: revisión de la memoria y redacción de informe de tutorización

10. IMPLICACIONES ÉTICAS

El TFG requiere autorización de la Comisión de Ética: Sí No

En caso afirmativo, es preceptivo adjuntar la autorización del Comité de Bioética de la Universidad de Jaén o, en su defecto, la solicitud realizada a dicha Comisión.

Nota informativa: Para completar este Anexo II se recomienda consultar la guía docente de la asignatura del Trabajo Fin de Grado que está disponible en el siguiente enlace:
https://uvirtual.ujaen.es/pub/es/informacionacademica/catalogoquiasdocentes/p/2014-15/2/103A/10316001/es/2014-15-10316001_es.html

Más información: <http://www10.ujaen.es/conocenos/centros/facexp/trabajofingrado>

Anexo II

TITULACIÓN: Grado en Química

MEMORIA INICIAL DEL TRABAJO FIN DE GRADO

CENTRO: Facultad de Ciencias Experimentales

CURSO ACADÉMICO: 2014-15



UNIVERSIDAD DE JAÉN
Facultad de Ciencias Experimentales

Título del Trabajo Fin de Grado:

Aceite esencial de *Thymus zygis*. Síntesis de derivados de timol

1. DATOS BÁSICOS DE LA ASIGNATURA

NOMBRE: Trabajo Fin de Grado

CÓDIGO: 10316001

CARÁCTER: Obligatorio

Créditos ECTS: 15

CURSO: Cuarto

CUATRIMESTRE: Segundo

2. TUTOR/COTUTOR(en su caso)

Joaquín Altarejos Caballero

Departamento de Química Inorgánica y Orgánica

Despacho B3-444

953-212743

jaltare@ujaen.es

3. VARIANTE Y TIPO DE TRABAJO FIN DE GRADO (Artículo 8 del Reglamento de los Trabajos Fin de Grado)

- Específico
- Experimental (A)

4. COMPETENCIAS (*) Y RESULTADOS DE APRENDIZAJE

Competencias Transversales:

- B1. Capacidad de análisis y síntesis.
- B2. Capacidad de organización y planificación.
- B3. Comunicación oral y escrita en la lengua nativa.
- B4. Conocimiento de una lengua extranjera (preferiblemente inglés).
- B5. Capacidad para la gestión de datos y la generación de información/ conocimiento mediante el uso de las nuevas tecnologías de información y comunicación.
- B6. Resolución de problemas.
- B7. Capacidad de adaptarse a nuevas situaciones y toma de decisiones.
- B8. Trabajo en equipo.
- B9. Razonamiento crítico.
- B10. Capacidad de aprendizaje autónomo para el desarrollo continuo profesional.
- B11. Sensibilidad hacia temas medioambientales.
- B12. Compromiso ético.
- B13. Iniciativa y espíritu emprendedor.

Competencias Generales:

- P1. Habilidad para manipular con seguridad materiales químicos, teniendo en cuenta sus propiedades físicas y químicas, incluyendo cualquier peligro específico asociado con su uso.
- P2. Habilidad para llevar a cabo procedimientos estándares de laboratorio implicados en trabajos analíticos y sintéticos, en relación con sistemas orgánicos e inorgánicos.
- P3. Habilidad para la observación, seguimiento y medida de propiedades, eventos o cambios químicos, y el registro sistemático y fiable de la documentación correspondiente.
- P4. Habilidad para manejar instrumentación química estándar, como la que se utiliza para investigaciones estructurales y separaciones.
- P5. Interpretación de datos procedentes de observaciones y medidas en el laboratorio en términos de su significación y de las teorías que la sustentan.
- P6. Capacidad para realizar valoraciones de riesgos relativos al uso de sustancias químicas y procedimientos de laboratorio.
- Q1. Capacidad para demostrar el conocimiento y comprensión de los hechos esenciales, conceptos, principios y teorías relacionadas con la Química.
- Q2. Capacidad de aplicar dichos conocimientos a la resolución de problemas cualitativos y cuantitativos según modelos previamente desarrollados.
- Q3. Competencia para evaluar, interpretar y sintetizar datos e información Química.
- Q4. Capacidad para reconocer y llevar a cabo buenas prácticas en el trabajo científico.
- Q5. Competencia para presentar, tanto en forma escrita como oral, material y argumentación científica a una audiencia especializada.
- Q6. Destreza en el manejo y procesado informático de datos e información química.

Competencias Específicas:

- C3. Aplicar los principios y procedimientos usados en el análisis químico y en la caracterización de los compuestos químicos.
- C33. Identificar las propiedades y aplicaciones de los productos naturales.



UNIVERSIDAD DE JAÉN

Resultados de aprendizaje

Resultado 311003D	Capacidad de integrar creativamente sus conocimientos para resolver un problema químico real.
Resultado 311003E	Capacidad para estructurar una defensa sólida de los puntos de vista personales apoyándose en conocimientos científicos bien fundados.
Resultado 311003F	Destreza en la elaboración de informes científicos complejos, bien estructurados y bien redactados.
Resultado 311003G	Destreza en la presentación oral de un trabajo, utilizando los medios audiovisuales más habituales.

5. ANTECEDENTES

Thymus zygis Loefl. ex L. es una planta aromática perteneciente a la familia Lamiaceae que crece espontáneamente en casi toda la Península Ibérica [1]. De ella se conocen tres subespecies, *zygis*, *sylvestris* y *gracilis* [1], y diversas razas químicas [2]. Su hoja es muy apreciada como condimento alimentario, y el aceite esencial que se obtiene a partir de este valioso tomillo tiene propiedades germicidas, antisépticas y antioxidantes, y por tanto resulta de gran interés en veterinaria, farmacia y aromaterapia [3]. En la provincia de Jaén crece la subespecie *gracilis*, siendo el componente mayoritario de las muestras analizadas hasta el momento el compuesto fenólico denominado timol [4]. El grupo de investigación en el que se desarrollará este Trabajo Fin de Grado (TFG) tiene experiencia en el análisis de aceites esenciales, como consecuencia del trabajo realizado durante años dentro de una de sus líneas de investigación dedicada al estudio químico y aprovechamiento de aceites esenciales [5].

6. HIPÓTESIS DE TRABAJO

La composición química de una planta depende en cierta medida de factores ambientales y genéticos, motivo por el que se han descrito frecuentemente diferencias en el perfil cromatográfico de muestras de una misma especie vegetal recogidas en lugares distintos o incluso dentro de una misma población [5]. Este hecho hay que tenerlo presente cuando se comercializa planta silvestre, pues la calidad de la misma va a depender de su composición, y ésta de los factores indicados. Se sabe que el tomillo objeto de estudio de este TFG posee una apreciable diversidad química, por lo que un primer objetivo del trabajo será determinar la composición química del aceite esencial de varias muestras de *Th. zygis* recogidas en distintos lugares de la provincia de Jaén, con la finalidad de conocer más sobre la potencial aplicación de la flora aromática y medicinal de nuestro entorno. Por otro lado, se sabe que la actividad antioxidante de un compuesto de naturaleza fenólica puede verse influida por su lipofilia, de tal modo que, como segundo objetivo de este TFG, se llevará a cabo la conversión química de uno de los componentes mayoritarios del aceite esencial de tomillo (timol) en derivados menos volátiles y más solubles en medios lipídicos.



UNIVERSIDAD DE JAÉN

7. BREVE DESCRIPCIÓN DE LAS ACTIVIDADES A REALIZAR

(1) Revisión bibliográfica y estudio de antecedentes. (2) Recogida de muestras de tomillo. (3) Obtención de aceites esenciales. (4) Análisis cromatográfico de los aceites esenciales e identificación de componentes. (5) Reacciones a partir de timol y caracterización espectroscópica de los productos purificados. (6) Redacción de la memoria del TFG y preparación de la exposición.

8. DOCUMENTACIÓN/BIBLIOGRAFÍA

[1] Morales, R. *Thymus* L. in Castroviejo, S., Aedo, C., Laínez, M., Muñoz-Garmendia, F., Nieto-Feliner, G., Paiva, J. & Benedí, C. (eds.). *Flora ibérica* 12, 349-409, Real Jardín Botánico, CSIC, Madrid, **2010**.

[2] Sáez, F. Essential oil variability of *Thymus zygis* growing wild in southeastern Spain, *Phytochemistry* **1995**, 40, 819-825.

[3] Surburg, H. Common Fragrance and Flavor Materials, Wiley-VCH, Weinheim, **2006**.

[4] Salido, S.; Altarejos, J.; Nogueras, M.; Sánchez, A. Informe final del proyecto "Estudio químico y aprovechamiento de plantas aromáticas en la provincia de Jaén. Parque Natural de las Sierras de Cazorla, Segura y Las Villas", Instituto de Estudios Giennenses, **2000**.

[5] Salido, S.; Valenzuela, L.R.; Altarejos, J.; Nogueras, M.; Sánchez, A.; Cano, E. Composition and infraspecific variability of *Artemisia herba-alba* from southern Spain, *Biochem. System. Ecol.* **2004**, 32, 265-277.

9. CRONOGRAMA PROVISIONAL

(1) Revisión bibliográfica y estudio de antecedentes: 80 h. (2) Recogida de muestras de tomillo: 10 h. (3) Obtención de aceites esenciales: 30 h. (4) Análisis cromatográfico de los aceites esenciales e identificación de componentes: 30 h. (5) Reacciones a partir de timol y caracterización espectroscópica de los productos purificados: 125 h. (6) Redacción de la memoria del TFG y preparación de la exposición: 100 h.

10. IMPLICACIONES ÉTICAS

El TFG requiere autorización de la Comisión de Ética: Sí No

En caso afirmativo, es preceptivo adjuntar la autorización del Comité de Bioética de la Universidad de Jaén o, en su defecto, la solicitud realizada a dicha Comisión.

Nota informativa: Para completar este Anexo II se recomienda consultar la guía docente de la asignatura del Trabajo Fin de Grado que está disponible en el siguiente enlace:

https://uvirtual.ujaen.es/pub/es/informacionacademica/catalogoguiasdocentes/p/2014-15/2/103A/10316001/es/2014-15-10316001_es.html

Más información: <http://www10.ujaen.es/conocenos/centros/facexp/trabajofingrado>

Anexo II

TITULACIÓN: Grado en Química
MEMORIA INICIAL DEL TRABAJO FIN DE GRADO
CENTRO: Facultad de Ciencias Experimentales
CURSO ACADÉMICO: 2014-15



UNIVERSIDAD DE JAÉN
Facultad de Ciencias Experimentales

Título del Trabajo Fin de Grado:

Contribución al estudio químico de la madera de cerezo

1. DATOS BÁSICOS DE LA ASIGNATURA

NOMBRE: Trabajo Fin de Grado

CÓDIGO: 10316001

CARÁCTER: Obligatorio

Créditos ECTS: 15

CURSO: Cuarto

CUATRIMESTRE: Segundo

2. TUTOR/COTUTOR(en su caso)

Joaquín Altarejos Caballero

Departamento de Química Inorgánica y Orgánica

Despacho B3-444

953-212743

jaltare@ujaen.es

3. VARIANTE Y TIPO DE TRABAJO FIN DE GRADO (Artículo 8 del Reglamento de los Trabajos Fin de Grado)

- Específico
- Experimental (A)

4. COMPETENCIAS (*) Y RESULTADOS DE APRENDIZAJE

Competencias Transversales:

- B1. Capacidad de análisis y síntesis.
- B2. Capacidad de organización y planificación.
- B3. Comunicación oral y escrita en la lengua nativa.
- B4. Conocimiento de una lengua extranjera (preferiblemente inglés).
- B5. Capacidad para la gestión de datos y la generación de información/ conocimiento mediante el uso de las nuevas tecnologías de información y comunicación.
- B6. Resolución de problemas.
- B7. Capacidad de adaptarse a nuevas situaciones y toma de decisiones.
- B8. Trabajo en equipo.
- B9. Razonamiento crítico.
- B10. Capacidad de aprendizaje autónomo para el desarrollo continuo profesional.
- B11. Sensibilidad hacia temas medioambientales.
- B12. Compromiso ético.
- B13. Iniciativa y espíritu emprendedor.

Competencias Generales:

- P1. Habilidad para manipular con seguridad materiales químicos, teniendo en cuenta sus propiedades físicas y químicas, incluyendo cualquier peligro específico asociado con su uso.
- P2. Habilidad para llevar a cabo procedimientos estándares de laboratorio implicados en trabajos analíticos y sintéticos, en relación con sistemas orgánicos e inorgánicos.
- P3. Habilidad para la observación, seguimiento y medida de propiedades, eventos o cambios químicos, y el registro sistemático y fiable de la documentación correspondiente.
- P4. Habilidad para manejar instrumentación química estándar, como la que se utiliza para investigaciones estructurales y separaciones.
- P5. Interpretación de datos procedentes de observaciones y medidas en el laboratorio en términos de su significación y de las teorías que la sustentan.
- P6. Capacidad para realizar valoraciones de riesgos relativos al uso de sustancias químicas y procedimientos de laboratorio.
- Q1. Capacidad para demostrar el conocimiento y comprensión de los hechos esenciales, conceptos, principios y teorías relacionadas con la Química.
- Q2. Capacidad de aplicar dichos conocimientos a la resolución de problemas cualitativos y cuantitativos según modelos previamente desarrollados.
- Q3. Competencia para evaluar, interpretar y sintetizar datos e información Química.
- Q4. Capacidad para reconocer y llevar a cabo buenas prácticas en el trabajo científico.
- Q5. Competencia para presentar, tanto en forma escrita como oral, material y argumentación científica a una audiencia especializada.
- Q6. Destreza en el manejo y procesado informático de datos e información química.

Competencias Específicas:

- C3. Aplicar los principios y procedimientos usados en el análisis químico y en la caracterización de los compuestos químicos.
- C33. Identificar las propiedades y aplicaciones de los productos naturales.



UNIVERSIDAD DE JAÉN

Resultados de aprendizaje

Resultado 311003D	Capacidad de integrar creativamente sus conocimientos para resolver un problema químico real.
Resultado 311003E	Capacidad para estructurar una defensa sólida de los puntos de vista personales apoyándose en conocimientos científicos bien fundados.
Resultado 311003F	Destreza en la elaboración de informes científicos complejos, bien estructurados y bien redactados.
Resultado 311003G	Destreza en la presentación oral de un trabajo, utilizando los medios audiovisuales más habituales.

5. ANTECEDENTES

El género *Prunus*, perteneciente a la familia Rosaceae, engloba unas 430 especies de árboles y arbustos diversos, entre los que se encuentra el cerezo (*Prunus avium* L.) [1]. Éste se cultiva en diferentes zonas del país por el interés comercial de sus valiosos frutos. También es sabido que la madera de cerezo es muy apreciada en ebanistería y posee cierto potencial en tonelería. A pesar de que son muchos los estudios llevados a cabo sobre composición química de *P. avium*, la mayoría de ellos se han centrado en la cereza [2], siendo comparativamente más escasos los referidos a la madera [3]. El grupo de investigación en el que se desarrollará este Trabajo Fin de Grado (TFG) tiene experiencia en el aislamiento de antioxidantes de frutos y maderas de diversos árboles típicamente mediterráneos, como consecuencia del trabajo realizado en los últimos quince años dentro de una de sus líneas de investigación dedicada a la revalorización de subproductos agrícolas [4].

6. HIPÓTESIS DE TRABAJO

La búsqueda de (nuevos) antioxidantes naturales que permitan satisfacer la creciente demanda de este tipo de productos en campos como la salud o la industria alimentaria es una actividad de considerable interés científico y empresarial. Por tal motivo son muchos los trabajos realizados sobre obtención de polifenoles a partir de todo tipo de plantas, alimentos, bebidas, etc., o incluso residuos agroindustriales [5]. Las partes leñosas de los residuos vegetales generados durante el proceso de poda de los árboles frutales podrían ser una interesante fuente de antioxidantes [4,6,7], motivo por el que se plantea con este TFG iniciar un estudio sobre composición química de madera de cerezo.

7. BREVE DESCRIPCIÓN DE LAS ACTIVIDADES A REALIZAR

(1) Revisión bibliográfica y estudio de antecedentes. (2) Recogida de muestras de poda de cerezo de distintas variedades. (3) Extracción de las muestras de madera de cerezo. (4) Análisis cromatográfico de extractos. (5) Aislamiento guiado de antioxidantes y caracterización espectroscópica. (6) Redacción de la memoria del TFG y preparación de la exposición.

8. DOCUMENTACIÓN/BIBLIOGRAFÍA

- [1] Poonam V.; Raunak, G.K.; Reddy, C.S.; Jain, R.; Sharma, S.K.; Prasad, A.K.; Parmar, V. S. Chemical constituents of the genus *Prunus* and their medicinal properties. *Curr. Med. Chem.* **2011**, *18*, 3758-3824.
- [2] Kelebek, H.; Selli, S. Evaluation of chemical constituents and antioxidant activity of sweet cherry (*Prunus avium* L.) cultivars, *Int. J. Food Sci. Technol.* **2011**, *46*, 2530-2537.
- [3] Sanz, M.; Cadahia, E.; Esteruelas, E.; Muñoz, A.M.; Fernández, B.; Hernández, T.; Estrella, I. Phenolic compounds in cherry (*Prunus avium*) heartwood with a view to their use in cooperage, *J. Agric. Food Chem.* **2010**, *58*, 4907-4914.
- [4] Pérez-Bonilla, M.; Salido, S.; van Beek, T.A.; Altarejos, J. Radical-scavenging compounds from olive tree (*Olea europaea* L.) wood, *J. Agric. Food Chem.* **2014**, *62*, 144-151.
- [5] Balasundram, N.; Sundram, K.; Samman, S. Phenolic compounds in plants and agri-industrial by-products: antioxidant activity, occurrence, and potential uses, *Food Chem.* **2006**, *99*, 191-203.
- [6] Romera, C. "Actividad antioxidante de una selección de residuos de poda". Diploma de Estudios Avanzados, Universidad de Jaén, **2006**.
- [7] Martínez, M. "Aislamiento de proantocianidinas de madera de ciruelo". Trabajo Fin de Grado, Universidad de Jaén, **2013**.

9. CRONOGRAMA PROVISIONAL

(1) Revisión bibliográfica y estudio de antecedentes: 80 h. (2) Recogida de muestras de poda de cerezo de distintas variedades: 5 h. (3) Extracción de las muestras de madera de cerezo: 35 h. (4) Análisis cromatográfico de extractos: 20 h. (5) Aislamiento guiado de antioxidantes y caracterización espectroscópica: 135 h. (6) Redacción de la memoria del TFG y preparación de la exposición: 100 h.

10. IMPLICACIONES ÉTICAS

El TFG requiere autorización de la Comisión de Ética: Sí No

En caso afirmativo, es preceptivo adjuntar la autorización del Comité de Bioética de la Universidad de Jaén o, en su defecto, la solicitud realizada a dicha Comisión.

Nota informativa: Para completar este Anexo II se recomienda consultar la guía docente de la asignatura del Trabajo Fin de Grado que está disponible en el siguiente enlace:

https://virtual.ujaen.es/pub/es/informacionacademica/catalogoguiasdocentes/p/2014-15/2/103A/10316001/es/2014-15-10316001_es.html

Más información: <http://www10.ujaen.es/conocenos/centros/facexp/trabajofingrado>

Anexo II

TITULACIÓN: Grado en Química

MEMORIA INICIAL DEL TRABAJO FIN DE GRADO

CENTRO: Facultad de Ciencias Experimentales

CURSO ACADÉMICO: 2014-15



UNIVERSIDAD DE JAÉN
Facultad de Ciencias Experimentales

Título del Trabajo Fin de Grado:

ESTUDIO DE REACCIONES DE CICLOADICIÓN DE DIENOS CON 5-NITROSOPIRIMIDINAS

1. DATOS BÁSICOS DE LA ASIGNATURA

NOMBRE: Trabajo Fin de Grado

CÓDIGO: 10316001

CARÁCTER: Obligatorio

Créditos ECTS: 15

CURSO: Cuarto

CUATRIMESTRE: Segundo

2. TUTOR/COTUTOR(en su caso)

Manuel Nogueras Montiel y Antonio Marchal Ingrain

3. VARIANTE Y TIPO DE TRABAJO FIN DE GRADO (Artículo 8 del Reglamento de los Trabajos Fin de Grado)

Específico: Experimental con Revisión bibliográfica

4. COMPETENCIAS (*) Y RESULTADOS DE APRENDIZAJE

Competencias transversales:

B1. Capacidad de análisis y síntesis.

B2. Capacidad de organización y planificación.

B3. Comunicación oral y escrita en la lengua nativa.

B4. Conocimiento de una lengua extranjera (preferiblemente inglés).

B5. Capacidad para la gestión de datos y la generación de información/ conocimiento mediante el uso de las nuevas tecnologías de información y comunicación.

B6. Resolución de problemas.

B7. Capacidad de adaptarse a nuevas situaciones y toma de decisiones.

B8. Trabajo en equipo.

B9. Razonamiento crítico.

B10. Capacidad de aprendizaje autónomo para el desarrollo continuo profesional.

B11. Sensibilidad hacia temas medioambientales.

B12. Compromiso ético.

B13. Iniciativa y espíritu emprendedor.

Competencias Generales:

P1. Habilidad para manipular con seguridad materiales químicos, teniendo en cuenta sus propiedades físicas y químicas, incluyendo cualquier peligro específico asociado con su uso.



UNIVERSIDAD DE JAÉN

P2. Habilidad para llevar a cabo procedimientos estándares de laboratorio implicados en trabajos analíticos y sintéticos, en relación con sistemas orgánicos e inorgánicos.

P3. Habilidad para la observación, seguimiento y medida de propiedades, eventos o cambios químicos, y el registro sistemático y fiable de la documentación correspondiente.

P4. Habilidad para manejar instrumentación química estándar, como la que se utiliza para investigaciones estructurales y separaciones.

P5. Interpretación de datos procedentes de observaciones y medidas en el laboratorio en términos de su significación y de las teorías que la sustentan.

P6. Capacidad para realizar valoraciones de riesgos relativos al uso de sustancias químicas y procedimientos de laboratorio.

Q1. Capacidad para demostrar el conocimiento y comprensión de los hechos esenciales, conceptos, principios y teorías relacionadas con la Química.

Q2. Capacidad de aplicar dichos conocimientos a la resolución de problemas cualitativos y cuantitativos según modelos previamente desarrollados.

Q3. Competencia para evaluar, interpretar y sintetizar datos e información Química.

Q4. Capacidad para reconocer y llevar a cabo buenas prácticas en el trabajo científico.

Q5. Competencia para presentar, tanto en forma escrita como oral, material y argumentación científica a una audiencia especializada.

Q6. Destreza en el manejo y procesado informático de datos e información química

Competencias Específicas:

C13. Comprender las principales rutas sintéticas en química orgánica, incluyendo la interconversión de grupos funcionales y la formación de enlaces carbono-carbono y carbono heteroátomo.

* Estas son las competencias mínimas. Añadir las competencias necesarias para cada Trabajo Fin de Grado propuesto

Resultados de aprendizaje

Resultado 311003D	Capacidad de integrar creativamente sus conocimientos para resolver un problema químico real.
Resultado 311003E	Capacidad para estructurar una defensa sólida de los puntos de vista personales apoyándose en conocimientos científicos bien fundados.
Resultado 311003F	Destreza en la elaboración de informes científicos complejos, bien estructurados y bien redactados.
Resultado 311003G	Destreza en la presentación oral de un trabajo, utilizando los medios audiovisuales más habituales.

5. ANTECEDENTES

En los últimos años se ha puesto a punto un nuevo procedimiento para la nitrosación de pirimidinas que ha hecho posible disponer de nitroso derivados hasta el momento no accesibles [1-3]. Las nitroso pirimidinas son intermedios valiosísimos en la síntesis de otros heterociclos fusionados tales como purinas [4,5], pteridinas [6] etc., de importancia biológica y farmacológica. Adicionalmente, las nitroso pirimidinas en sí mismas son también sustratos útiles en el campo de la química médica: inhibidores de ciclinas dependientes de quinasas (CDKs) [7], de O⁶-alquilguanina DNA alquiltransferasa (AGT) [8], antifúngicos [9,10], etc.

Las 4,6-dialcoxi-2-amino-5-nitrosopirimidinas han demostrado ser especialmente útiles en la

preparación de 5-nitrosopirimidinas di o triamino sustituidas por aminolisis de los grupos alcoxi con diversos tipos de aminas [1-3].

Mediante el uso de alilamina, en las condiciones adecuadas, es posible obtener 6-alcoxi-4-alilamino-2-amino-5-nitrosopirimidina [2,3]. La presencia del doble enlace alílico permite llevar a cabo cicloadiciones [4+2] con dienos adecuados y transformar los aductos Diels-Alder en pirimidinas fusionadas con sustituyentes poco habituales con potencial actividad biológico [4,5].

Especialmente interesante será la posibilidad de obtener de forma rápida y eficiente purinas 8-sustituidas que no sean bibliográficas o que sean de difícil acceso.

6. HIPÓTESIS DE TRABAJO

Partiendo de procedimientos recientes y novedosos se preparará 4-Alilamino-6-metoxi-5-nitrosopirimidina con la intención de testar el grupo alilo exocíclico en reacciones de cicloadición [4+2] con dienófilos simétricos. Los posibles cicloaductos podrán ser convertidos en pirimidinas fusionadas con patrones de sustitución novedosos.

7. BREVE DESCRIPCIÓN DE LAS ACTIVIDADES A REALIZAR

1.- Análisis y Revisión de la bibliográfica relacionada con los antecedentes y la hipótesis de trabajo.

2.- Selección de materiales.

3.- Realización del trabajo experimental consistente en:

a) Preparación de 2-amino-4,6-dimetoxi-5-nitrosopirimidina (**II**) a partir de 2-amino-4,6-dimetoxipirimidina (**I**) comercial utilizando el procedimiento previamente publicado [1,2].

b) Preparación de 4-alilamino-2-amino-6-metoxi-5-nitrosopirimidina (**III**) mediante aminolisis con alilamina de la nitroso pirimidina (**II**) utilizando el procedimiento previamente publicado [1,2].

c) Estudio de la reactividad de la alilaminopirimidina (**III**) con ciclopentadieno (**a**) y con 2,3-dimetilbuta-1,3-dieno (**b**) bajo diferentes condiciones y el empleo de metodologías respetuosas con el medio ambiente (ausencia de solvente, activación con microondas) [11] con el fin de conseguir productos (**IVa** y **IVb**) con alta pureza y en cantidades tales que permitan su caracterización mediante técnicas espectroscópicas (RMN, IR, EM, etc).

d) Estudio de las mejores condiciones para obtener purinas 8-sustituidas **V**, con alta pureza y en cantidades tales que permitan su caracterización mediante técnicas espectroscópicas (RMN, IR, EM, etc), a partir del nitrosoderivado (**III**) y de los nuevos derivados obtenidos en el apartado c), siguiendo algunos antecedentes bibliográficos [12-14].

4.- Análisis, interpretación y discusión de resultados

5.- Elaboración de la Memoria de Trabajo de Fin de Grado

6.- Defensa del Trabajo de Fin de Grado

8. DOCUMENTACIÓN/BIBLIOGRAFÍA

(1) M. Melguizo, A. Marchal, M. Nogueras, A. Sánchez, J.N. Low., *J. Heterocycl. Chem.*, **2002**, 39, 97-103.

(2) A. Marchal, M. Nogueras, A. Sánchez, J.N. Low, L. Naesens, E. De Clercq, M. Melguizo, *Eur. J. Org. Chem.*, **2010**, 3823-3830.

(3) E.J. MacLean, J.N. Low, A. Quesada, M. Melguizo, M. Nogueras, C. Glidewell, *Acta Cryst.*, **2002**, C58, o442-0444.

(4) J. H. Lister (Ed.) *The Chemistry of Heterocyclic Compounds: The Purines. John Wiley and Sons, Inc.*,

New York, **1966** y suplementos posteriores.

- (5) M. Legraverend, *Tetrahedron*, **2008**, 64, 8585–8603.
- (6) Sayed A. Ahmed, Ahmed H. Elghandour and Hussein S. Elgendy, *Der Pharma Chemica*, **2014**, 6, 194-219.
- (7) A. Ece, F. Sevin, *Med. Chem. Res.*, **2013**, 22, 5832-5843.
- (8) I. Terashima, K. Kohda, *J. Med. Chem.*, **1998**, 41, 503-508.
- (9) M. Olivella, A. Marchal, M. Nogueras, A. Sánchez, M. Melguizo, M. Raimondi, S. Zacchino, F. Giannini, J. Cobo, R.D. Enriz, *Bioorg. Med. Chem.*, **2012**, 20, 6109-6122.
- (10) M. Olivella, A. Marchal, M. Nogueras, M. Melguizo, G. Lima, A. Tapia, G. Feresin, O. Parravicini, S. Andujar, J. Cobo, R.D. Enriz, *aceptado para publicación en Archiv der Pharmazie*. **2015**.
- (11) P. Cabildo, P. Cornago, C. Escolástico, S. Esteban, M.A. Farrán, M. Pérez, D. Sanz, *Procesos Orgánicos de bajo impacto ambiental. Química verde*. Madrid: Universidad Nacional de Educación a Distancia, **2006**.
- (12) H. Fuchs, M. Gottlieb, W. Pfeleiderer, *Chem. Ber.*, **1978**, 111, 982.
- (13) H. Goldner, G. Dietz, E. Carstens, *Liebigs Ann. Chem.*, **1966**, 692, 134.
- (14) F. Yahioğlu, C.W. Pouton, M.D. Threadgill, *Bioconjugate Chem.*, **1997**, 8, 611-616.

9. CRONOGRAMA PROVISIONAL

Flexible. 10 horas semanales durante las 15 semanas del Segundo cuatrimestre. El alumno las distribuirá según su interés y los condicionamientos experimentales a lo largo de cada semana, pudiendo incluso acumular más horas en alguna semana a costa de otra.

10. IMPLICACIONES ÉTICAS

El TFG requiere autorización de la Comisión de Ética: Sí No

En caso afirmativo, es preceptivo adjuntar la autorización del Comité de Bioética de la Universidad de Jaén o, en su defecto, la solicitud realizada a dicha Comisión.

Nota informativa: Para completar este Anexo II se recomienda consultar la guía docente de la asignatura del Trabajo Fin de Grado que está disponible en el siguiente enlace:

https://uvirtual.ujaen.es/pub/es/informacionacademica/catalogoguiasdocentes/p/2014-15/2/103A/10316001/es/2014-15-10316001_es.html

Más información: <http://www10.ujaen.es/conocenos/centros/facexp/trabajofingrado>

Anexo II

TITULACIÓN: Grado en Química

MEMORIA INICIAL DEL TRABAJO FIN DE GRADO

CENTRO: Facultad de Ciencias Experimentales

CURSO ACADÉMICO: 2014-15



UNIVERSIDAD DE JAÉN
Facultad de Ciencias Experimentales

Título del Trabajo Fin de Grado:

SÍNTESIS DE DERIVADOS DE 4-AMINO-6-BENCILOXI-5-NITROSOPIRIMIDINAS

1. DATOS BÁSICOS DE LA ASIGNATURA

NOMBRE: Trabajo Fin de Grado

CÓDIGO: 10316001

CARÁCTER: Obligatorio

Créditos ECTS: 15

CURSO: Cuarto

CUATRIMESTRE: Segundo

2. TUTOR/COTUTOR(en su caso)

Antonio Marchal Ingraín y Justo Cobo Domingo

3. VARIANTE Y TIPO DE TRABAJO FIN DE GRADO (Artículo 8 del Reglamento de los Trabajos Fin de Grado)

Específico: Experimental con Revisión bibliográfica

4. COMPETENCIAS (*) Y RESULTADOS DE APRENDIZAJE

Competencias transversales:

B1. Capacidad de análisis y síntesis.

B2. Capacidad de organización y planificación.

B3. Comunicación oral y escrita en la lengua nativa.

B4. Conocimiento de una lengua extranjera (preferiblemente inglés).

B5. Capacidad para la gestión de datos y la generación de información/ conocimiento mediante el uso de las nuevas tecnologías de información y comunicación.

B6. Resolución de problemas.

B7. Capacidad de adaptarse a nuevas situaciones y toma de decisiones.

B8. Trabajo en equipo.

B9. Razonamiento crítico.

B10. Capacidad de aprendizaje autónomo para el desarrollo continuo profesional.

B11. Sensibilidad hacia temas medioambientales.

B12. Compromiso ético.

B13. Iniciativa y espíritu emprendedor.

Competencias Generales:

P1. Habilidad para manipular con seguridad materiales químicos, teniendo en cuenta sus propiedades físicas y químicas, incluyendo cualquier peligro específico asociado con su uso.



UNIVERSIDAD DE JAÉN

P2. Habilidad para llevar a cabo procedimientos estándares de laboratorio implicados en trabajos analíticos y sintéticos, en relación con sistemas orgánicos e inorgánicos.

P3. Habilidad para la observación, seguimiento y medida de propiedades, eventos o cambios químicos, y el registro sistemático y fiable de la documentación correspondiente.

P4. Habilidad para manejar instrumentación química estándar, como la que se utiliza para investigaciones estructurales y separaciones.

P5. Interpretación de datos procedentes de observaciones y medidas en el laboratorio en términos de su significación y de las teorías que la sustentan.

P6. Capacidad para realizar valoraciones de riesgos relativos al uso de sustancias químicas y procedimientos de laboratorio.

Q1. Capacidad para demostrar el conocimiento y comprensión de los hechos esenciales, conceptos, principios y teorías relacionadas con la Química.

Q2. Capacidad de aplicar dichos conocimientos a la resolución de problemas cualitativos y cuantitativos según modelos previamente desarrollados.

Q3. Competencia para evaluar, interpretar y sintetizar datos e información Química.

Q4. Capacidad para reconocer y llevar a cabo buenas prácticas en el trabajo científico.

Q5. Competencia para presentar, tanto en forma escrita como oral, material y argumentación científica a una audiencia especializada.

Q6. Destreza en el manejo y procesado informático de datos e información química

Competencias Específicas:

C13. Comprender las principales rutas sintéticas en química orgánica, incluyendo la interconversión de grupos funcionales y la formación de enlaces carbono-carbono y carbono heteroátomo.

* Estas son las competencias mínimas. Añadir las competencias necesarias para cada Trabajo Fin de Grado propuesto

Resultados de aprendizaje

Resultado 311003D	Capacidad de integrar creativamente sus conocimientos para resolver un problema químico real.
Resultado 311003E	Capacidad para estructurar una defensa sólida de los puntos de vista personales apoyándose en conocimientos científicos bien fundados.
Resultado 311003F	Destreza en la elaboración de informes científicos complejos, bien estructurados y bien redactados.
Resultado 311003G	Destreza en la presentación oral de un trabajo, utilizando los medios audiovisuales más habituales.

5. ANTECEDENTES

Recientemente se ha descrito la síntesis de una serie de 5-nitrosopirimidinas [1,2] y evaluado su actividad como agentes antifúngicos y antibacterianos [3,4]. De todos los compuestos analizados, las pirimidinas **1-3** (ver figura 1) han demostrado actividad frente a varias cepas patógenas humanas siendo más activas como antibacterianos que como antifúngicos.

Estudios que relacionan las estructuras de las moléculas indicadas con su actividad demuestran la importancia sobre la actividad de un segundo anillo aromático, la asistencia del grupo nitroso y del enlace de hidrógeno intramolecular entre el oxígeno del grupo nitroso y el hidrógeno del grupo

amino en alfa del anillo pirimidínico.

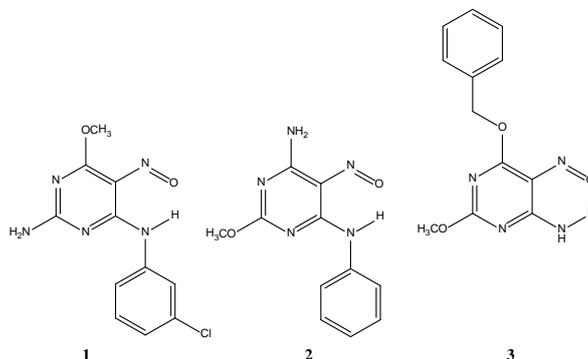
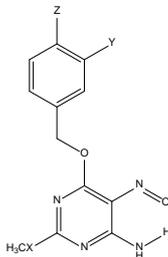


Figura 1

Sin embargo la aplicabilidad médica de estos compuestos se ve altamente limitada por su alta toxicidad aguda, por lo que resulta conveniente llevar a cabo modificaciones estructurales que permitan eliminar la toxicidad pero a su vez mantener la actividad antifúngica y/o antibacteriana.

6. HIPÓTESIS DE TRABAJO

Partiendo de procedimientos previamente descritos en la literatura [1-7] se pretende llevar a cabo el estudio de las condiciones más óptimas y sostenibles [8] que permitan obtener una serie de análogos a la 5-nitrosopirimidina **3** con alta pureza y en cantidades tales que sea factible llevar a cabo su caracterización mediante diferentes técnicas espectroscópicas (RMN, IR, EM, etc) y los correspondientes estudios de actividad y toxicidad.



7. BREVE DESCRIPCIÓN DE LAS ACTIVIDADES A REALIZAR

- 1.- Análisis y Revisión de la bibliográfica relacionada con los antecedentes y la hipótesis de trabajo.
- 2.- Selección de materiales.
- 3.- Realización del trabajo experimental
- 4.- Análisis, interpretación y discusión de resultados
- 5.- Elaboración de la Memoria de Trabajo de Fin de Grado
- 6.- Defensa del Trabajo de Fin de Grado

8. DOCUMENTACIÓN/BIBLIOGRAFÍA

(1) A. Marchal, M. Melguizo, M. Nogueras, A. Sánchez, J.N. Low., *J. Synlett*, **2002**, 2, 55-58.



UNIVERSIDAD DE JAÉN

- (2) A. Marchal, M. Nogueras, A. Sánchez, J.N. Low, L. Naesens, E. De Clercq, M. Melguizo, *Eur. J. Org. Chem.*, **2010**, 3823-3830.
- (3) M. Olivella, A. Marchal, M. Nogueras, A. Sánchez, M. Melguizo, M. Raimondi, S. Zacchino, F. Giannini, J. Cobo, R.D. Enriz, *Bioorg. Med. Chem.*, **2012**, 20, 6109-6122.
- (4) M. Olivella, A. Marchal, M. Nogueras, M. Melguizo, G. Lima, A. Tapia, G. Feresin, O. Parravicini, S. Andujar, J. Cobo, R.D. Enriz, *aceptado para publicación en Archiv der Pharmazie*. **2015**.
- (5) C. Glidewell, J.N. Low, A. Marchal, A. Quesada, *Acta Cryst.*, **2003**, C59, o454-0460.
- (6) M. Engelman, *Chem. Ber.* **1909**, 42, 177-182.
- (7) B.R. Baker, J. P. Joseph, R. E. Schaub, *J. Org. Chem.*, **1954**, 19, 631-637.
- (8) P. Cabildo, P. Cornago, C. Escolástico, S. Esteban, M.A. Farrán, M. Pérez, D. Sanz, *Procesos Orgánicos de bajo impacto ambiental. Química verde*. Madrid: Universidad Nacional de Educación a Distancia, **2006**.

9. CRONOGRAMA PROVISIONAL

Flexible. 10 horas semanales durante las 15 semanas del Segundo cuatrimestre. El alumno las distribuirá según su interés y los condicionamientos experimentales a lo largo de cada semana, pudiendo incluso acumular más horas en alguna semana a costa de otra.

10. IMPLICACIONES ÉTICAS

El TFG requiere autorización de la Comisión de Ética: Sí No

En caso afirmativo, es preceptivo adjuntar la autorización del Comité de Bioética de la Universidad de Jaén o, en su defecto, la solicitud realizada a dicha Comisión.

Nota informativa: Para completar este Anexo II se recomienda consultar la guía docente de la asignatura del Trabajo Fin de Grado que está disponible en el siguiente enlace:
https://uvirtual.ujaen.es/pub/es/informacionacademica/catalogoquiadocentes/p/2014-15/2/103A/10316001/es/2014-15-10316001_es.html

Más información: <http://www10.ujaen.es/conocenos/centros/facexp/trabajofingrado>

Anexo II

TITULACIÓN: Grado en Química

MEMORIA INICIAL DEL TRABAJO FIN DE GRADO

CENTRO: Facultad de Ciencias Experimentales

CURSO ACADÉMICO: 2014-15



UNIVERSIDAD DE JAÉN
Facultad de Ciencias Experimentales

Título del Trabajo Fin de Grado: FUNCIONALIZACIÓN DE NANOTUBOS DE CARBONO: APLICACIONES CATALÍTICAS

1. DATOS BÁSICOS DE LA ASIGNATURA

NOMBRE: Trabajo Fin de Grado

CÓDIGO: 10316001

CARÁCTER: Obligatorio

Créditos ECTS: 15

CURSO: Cuarto

CUATRIMESTRE: Segundo

2. TUTOR/COTUTOR(en su caso)

M^a Dolores López de la Torre

DEPARTAMENTO: U128-QUÍMICA INORGÁNICA Y ORGÁNICA

ÁREA: QUÍMICA ORGÁNICA

DESPACHO: B3-464

E-MAIL: mdlopez@ujaen.es

TLF: 953 212748

M^a Celeste García Gallarín

DEPARTAMENTO: U128-QUÍMICA INORGÁNICA Y ORGÁNICA

ÁREA: QUÍMICA ORGÁNICA

DESPACHO: B3-451

E-MAIL: cgarcía@ujaen.es

TLF: 953 212749

3. VARIANTE Y TIPO DE TRABAJO FIN DE GRADO (Artículo 8 del Reglamento de los Trabajos Fin de Grado)

A.-Trabajo experimental



UNIVERSIDAD DE JAÉN

4. COMPETENCIAS (*) Y RESULTADOS DE APRENDIZAJE

Competencias transversales:

- B1. Capacidad de análisis y síntesis.
- B2. Capacidad de organización y planificación.
- B3. Comunicación oral y escrita en la lengua nativa.
- B4. Conocimiento de una lengua extranjera (preferiblemente inglés).
- B5. Capacidad para la gestión de datos y la generación de información/ conocimiento mediante el uso de las nuevas tecnologías de información y comunicación.
- B6. Resolución de problemas.
- B7. Capacidad de adaptarse a nuevas situaciones y toma de decisiones.
- B8. Trabajo en equipo.
- B9. Razonamiento crítico.
- B10. Capacidad de aprendizaje autónomo para el desarrollo continuo profesional.
- B11. Sensibilidad hacia temas medioambientales.
- B12. Compromiso ético.
- B13. Iniciativa y espíritu emprendedor.

Competencias Generales:

- P1. Habilidad para manipular con seguridad materiales químicos, teniendo en cuenta sus propiedades físicas y químicas, incluyendo cualquier peligro específico asociado con su uso.
- P2. Habilidad para llevar a cabo procedimientos estándares de laboratorio implicados en trabajos analíticos y sintéticos, en relación con sistemas orgánicos e inorgánicos.
- P3. Habilidad para la observación, seguimiento y medida de propiedades, eventos o cambios químicos, y el registro sistemático y fiable de la documentación correspondiente.
- P4. Habilidad para manejar instrumentación química estándar, como la que se utiliza para investigaciones estructurales y separaciones.
- P5. Interpretación de datos procedentes de observaciones y medidas en el laboratorio en términos de su significación y de las teorías que la sustentan.
- P6. Capacidad para realizar valoraciones de riesgos relativos al uso de sustancias químicas y procedimientos de laboratorio.
- Q1. Capacidad para demostrar el conocimiento y comprensión de los hechos esenciales, conceptos, principios y teorías relacionadas con la Química.
- Q2. Capacidad de aplicar dichos conocimientos a la resolución de problemas cualitativos y cuantitativos según modelos previamente desarrollados.
- Q3. Competencia para evaluar, interpretar y sintetizar datos e información Química.
- Q4. Capacidad para reconocer y llevar a cabo buenas prácticas en el trabajo científico.
- Q5. Competencia para presentar, tanto en forma escrita como oral, material y argumentación científica a una audiencia especializada.
- Q6. Destreza en el manejo y procesado informático de datos e información química

Competencias Específicas:

* Estas son las competencias mínimas. Añadir las competencias necesarias para cada Trabajo Fin de Grado propuesto

Resultados de aprendizaje

**Resultado
311003D**

Capacidad de integrar creativamente sus conocimientos para resolver un problema químico real.

Resultado 311003E	Capacidad para estructurar una defensa sólida de los puntos de vista personales apoyándose en conocimientos científicos bien fundados.
Resultado 311003F	Destreza en la elaboración de informes científicos complejos, bien estructurados y bien redactados.
Resultado 311003G	Destreza en la presentación oral de un trabajo, utilizando los medios audiovisuales más habituales.

5. ANTECEDENTES

La experiencia adquirida de nuestro grupo de investigación FQM-273, en la síntesis de carbones activados soportados [1], [2], [3], [4] ha dado como resultado la puesta a punto de un procedimiento de síntesis de dichos carbones activados soportados, con buenos rendimientos. En esos mismos trabajos, se han llevado a cabo reacciones de catálisis actuando el material carbonoso soportado como catalizador. Las reacciones hasta ahora ensayadas han dado muy buenos resultados, ofreciendo además la ventaja de utilizar agua como disolvente. En este sentido, se extenderá esta metodología a nanotubos de carbono, en la cual nuestro grupo tiene experiencia previa.

6. HIPÓTESIS DE TRABAJO

En este Trabajo de fin de Grado (TFG) se pretende introducir al alumno en tareas de investigación, en este caso, correspondientes a la metodología de trabajo con los CNTs (Carbon Nanotubes).

Para ello, se aplicará el método de funcionalización de materiales carbonosos a CNTs propuesto por nuestro grupo en trabajos anteriores, [5], [6] para conseguir la modificación química superficial de (CNTs). Con respecto a los carbones activados, los CNTs presentan la ventaja de que toda su superficie es superficie externa, careciendo de poros estrechos y permitiendo que toda su superficie sea fácilmente accesible a los receptores moleculares y a los iones metálicos; así mismo, tienen mayor estabilidad térmica y química, por lo que constituyen excelentes plataformas para el desarrollo de catalizadores heterogéneos y catalizadores soportados que, en nuestro caso dirigiremos a catálisis de hidrogenación selectiva y de acoplamiento C-C con catalizadores soportados, empleando disolventes respetuosos con el medio ambiente (figura 1).

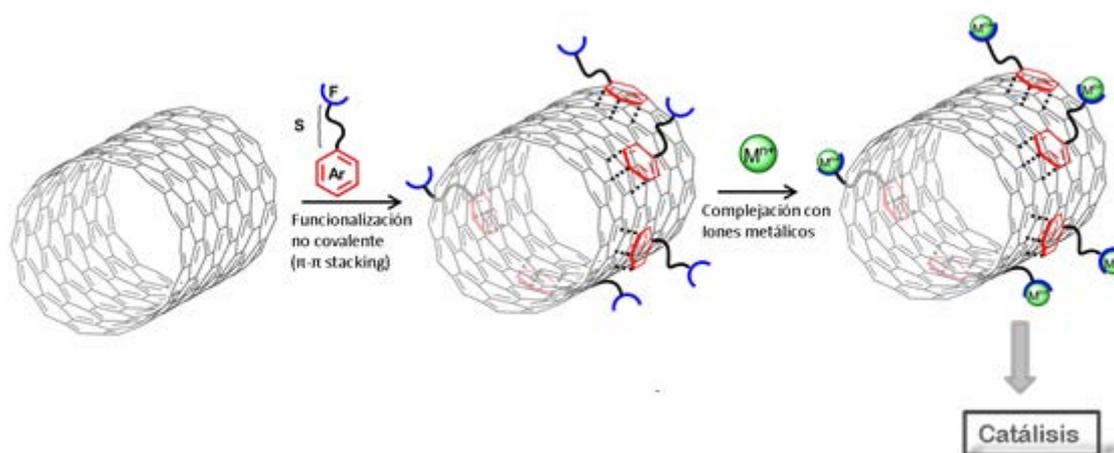


Figura 1: Esquema general del planteamiento para preparación de catalizadores soportados sobre CNTs [7].

En líneas generales, en este trabajo se plantea la síntesis de un receptor molecular que presenta un fragmento aromático de carácter polar, que actuará como posición de anclaje a los CNTs. Para ello, hemos elegido el derivado pirimidínico: 6-amino-3-metil-2-metoxi-5-nitrosopirimidin-4(3H)-



UNIVERSIDAD DE JAÉN

ona; a la que se va a anclar tris-(2-aminoetil) amina (Ar-S-F). Una vez sintetizado el receptor, se adsorberá, previsiblemente de forma irreversible sobre los CNTs (CNT/Ar-S-F). Posteriormente, dicho material CNT/Ar-SF se utilizará en la retención de Pd(II). Finalmente, se llevarán a cabo reacciones catalíticas de hidrogenación y de acoplamiento C-C para estudiar la versatilidad de este tipo de materiales [8].

7. BREVE DESCRIPCIÓN DE LAS ACTIVIDADES A REALIZAR

- Revisión bibliográfica del tema.
- Definición de los objetivos del trabajo.
- Realización del trabajo experimental.
- Elaboración de la memoria final del Trabajo de fin de Grado.
- Defensa pública de dicho trabajo.

8. DOCUMENTACIÓN/BIBLIOGRAFÍA

[1] López de la Torre, M., Melguizo Guijarro, M., Eur. Org. Chem., 2010, 5147.

[2] A. Peñas, Tesis Doctoral, 2011.

[3] Penas San Juan, Antonio; Melguizo Guijarro, Manuel; Lopez Garzón, Rafael; Gutierrez Valero, Maria Dolores; Godino Salido, Maria Luz; Arranz Mascaros, Paloma; Garcia Gallarín, Celeste; López De La Torre, Maria Dolores; Lopez Garzón, Francisco Javier; Domingo Garcia, Maria; Pérez Mendoza, Manuel, PCT Int. Appl. (2012), WO 2012066173 A1 20120524.

[4] Santiago, Antonio, Tesis Doctoral, 2011.

[5] J. García-Martín, R. López-Garzón, M. L. Godino-Salido, M. D. Gutiérrez-Valero, P. Arranz-Mascarós, R. Cuesta-Martos, F. Carrasco-Marín; Langmuir, 2005, 21, 6908.

[6] J. García-Martín, R. López-Garzón, M. L. Godino-Salido, R. Cuesta-Martos, M. D. Gutiérrez-Valero, P. Arranz-Mascarós, H. Stoeckli-Evans; Eur. J. Inorg. Chem., 2005, 3093-3103.

[7] Esquema realizado por el Dr. M. Melguizo, Profesor Titular en el Dpto. de Química Inorgánica y Orgánica de la Universidad de Jaén.

[8] E. Rangel Rangel, E. M., Maya, F., Sánchez, J. G., de la Campa, M. Iglesias, J. Name., 2012, 0, 1-3.



UNIVERSIDAD DE JAÉN

9. CRONOGRAMA PROVISIONAL

15 créditos, 375 horas

10. IMPLICACIONES ÉTICAS

El TFG requiere autorización de la Comisión de Ética: Sí No

En caso afirmativo, es preceptivo adjuntar la autorización del Comité de Bioética de la Universidad de Jaén o, en su defecto, la solicitud realizada a dicha Comisión.

Nota informativa: Para completar este Anexo II se recomienda consultar la guía docente de la asignatura del Trabajo Fin de Grado que está disponible en el siguiente enlace:

https://uvirtual.ujaen.es/pub/es/informacionacademica/catalogoguiasdocentes/p/2014-15/2/103A/10316001/es/2014-15-10316001_es.html

Más información: <http://www10.ujaen.es/conocenos/centros/facexp/trabajofingrado>

Anexo II

TITULACIÓN: Grado en Química

MEMORIA INICIAL DEL TRABAJO FIN DE GRADO

CENTRO: Facultad de Ciencias Experimentales

CURSO ACADÉMICO: 2014-15



UNIVERSIDAD DE JAÉN
Facultad de Ciencias Experimentales

Título del Trabajo Fin de Grado:

Síntesis y caracterización estructural de receptores iónicos con doble capacidad de complejación derivados de 2-amino-5-nitrosopirimidinas. Funcionalización de nanotubos de carbono con estos receptores.

1. DATOS BÁSICOS DE LA ASIGNATURA

NOMBRE: Trabajo Fin de Grado

CÓDIGO: 10316001

CARÁCTER: Obligatorio

Créditos ECTS: 15

CURSO: Cuarto

CUATRIMESTRE: Primero

2. TUTOR/COTUTOR(en su caso)

Tutora: Dra. Celeste García Gallarín

Cotutor: Manuel Melguizo Guijarro

3. VARIANTE Y TIPO DE TRABAJO FIN DE GRADO (Artículo 8 del Reglamento de los Trabajos Fin de Grado)

Experimental



UNIVERSIDAD DE JAÉN

4. COMPETENCIAS (*) Y RESULTADOS DE APRENDIZAJE

Competencias transversales:

- B1. Capacidad de análisis y síntesis.
- B2. Capacidad de organización y planificación.
- B3. Comunicación oral y escrita en la lengua nativa.
- B4. Conocimiento de una lengua extranjera (preferiblemente inglés).
- B5. Capacidad para la gestión de datos y la generación de información/ conocimiento mediante el uso de las nuevas tecnologías de información y comunicación.
- B6. Resolución de problemas.
- B7. Capacidad de adaptarse a nuevas situaciones y toma de decisiones.
- B8. Trabajo en equipo.
- B9. Razonamiento crítico.
- B10. Capacidad de aprendizaje autónomo para el desarrollo continuo profesional.
- B11. Sensibilidad hacia temas medioambientales.
- B12. Compromiso ético.
- B13. Iniciativa y espíritu emprendedor.

Competencias Generales:

- P1. Habilidad para manipular con seguridad materiales químicos, teniendo en cuenta sus propiedades físicas y químicas, incluyendo cualquier peligro específico asociado con su uso.
- P2. Habilidad para llevar a cabo procedimientos estándares de laboratorio implicados en trabajos analíticos y sintéticos, en relación con sistemas orgánicos e inorgánicos.
- P3. Habilidad para la observación, seguimiento y medida de propiedades, eventos o cambios químicos, y el registro sistemático y fiable de la documentación correspondiente.
- P4. Habilidad para manejar instrumentación química estándar, como la que se utiliza para investigaciones estructurales y separaciones.
- P5. Interpretación de datos procedentes de observaciones y medidas en el laboratorio en términos de su significación y de las teorías que la sustentan.
- P6. Capacidad para realizar valoraciones de riesgos relativos al uso de sustancias químicas y procedimientos de laboratorio.
- Q1. Capacidad para demostrar el conocimiento y comprensión de los hechos esenciales, conceptos, principios y teorías relacionadas con la Química.
- Q2. Capacidad de aplicar dichos conocimientos a la resolución de problemas cualitativos y cuantitativos según modelos previamente desarrollados.
- Q3. Competencia para evaluar, interpretar y sintetizar datos e información Química.
- Q4. Capacidad para reconocer y llevar a cabo buenas prácticas en el trabajo científico.
- Q5. Competencia para presentar, tanto en forma escrita como oral, material y argumentación científica a una audiencia especializada.
- Q6. Destreza en el manejo y procesado informático de datos e información química

Competencias Específicas:

* Estas son las competencias mínimas. Añadir las competencias necesarias para cada Trabajo Fin de Grado propuesto

Resultados de aprendizaje

**Resultado
311003D**

Capacidad de integrar creativamente sus conocimientos para resolver un problema químico real.



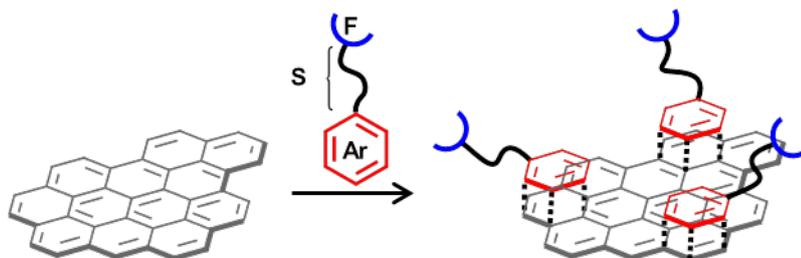
UNIVERSIDAD DE JAÉN

Resultado 311003E	Capacidad para estructurar una defensa sólida de los puntos de vista personales apoyándose en conocimientos científicos bien fundados.
Resultado 311003F	Destreza en la elaboración de informes científicos complejos, bien estructurados y bien redactados.
Resultado 311003G	Destreza en la presentación oral de un trabajo, utilizando los medios audiovisuales más habituales.

5. ANTECEDENTES

La funcionalización no covalente [1] de sólidos carbonosos empleando derivados de 2-amino-5-nitrosopirimidina sustituidos en C(4) con funciones capaces de complejar iones metálicos y/o aniones es una metodología de funcionalización selectiva de la superficie de sólidos carbonosos en la que el grupo de investigación, donde se llevará a cabo el presente trabajo, tiene probada experiencia [2].

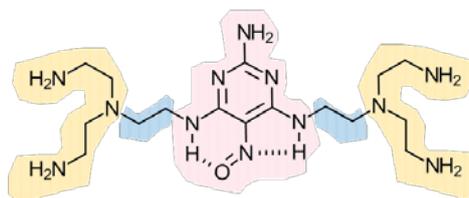
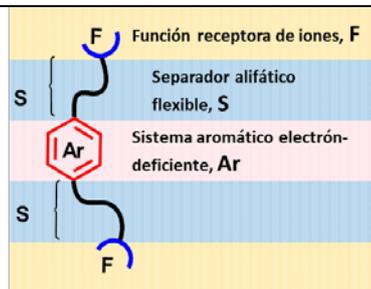
Esta metodología comienza por la preparación de los receptores que serán anclados a la superficie del carbón; éstos cuentan con dos zonas funcionales segregadas: una es la unidad de anclaje a la superficie del carbón (Ar), y la otra, una función receptora de iones que quedará pendiendo de la superficie del sólido carbonoso y que mantiene las propiedades complejantes que tenía en disolución acuosa antes de ser anclada a la superficie del carbón (F). Estas dos unidades funcionales se encuentran conectadas covalentemente a través de un separador (S) [3]



Esquema 1. Representación de la interacción receptor-superficie gráfica [2].

6. HIPÓTESIS DE TRABAJO

Hasta ahora los receptores sintetizados contienen una única función receptora de iones, F, unida a la función de anclaje, Ar,[2] y es nuestra intención preparar nuevos receptores con dos funciones receptoras por cada función de anclaje, con el doble objetivo de: aumentar la densidad de funciones receptoras disponibles para una misma extensión de superficie gráfica y facilitar el trabajo cooperativo de dos funciones en la complejación de especies químicas voluminosas con múltiples puntos de interacción. Con este objetivo, hemos pensado en la síntesis de un compuesto con un núcleo central heteroaromático derivado de 2-amino-5-nitrosopirimidina, cuyas posiciones C(4) y C(6) están ocupadas por dos residuos de tris(2-etilamino)amina, de forma que la estructura final de este compuesto presenta las características fundamentales de otros derivados similares utilizados con anterioridad en la funcionalización no covalente de superficies de tipo gráfica. Esto es, una unidad de anclaje no-covalente (mediante interacciones π - π) a superficies gráficas, constituida por un núcleo heteroaromático (2-amino-5-nitrosopirimidina) al que se unen, en el trabajo que planteamos, dos cadenas de las que penden dos unidades funcionales de dietilentriamina.



Partiendo de 2-amino-4,6-dimetoxi-5-nitrosopirimidina y tris(2-aminoetil)amina, ambos reactivos comerciales, se diseñará y ejecutará la síntesis del receptor esquematizado haciendo uso de distintas etapas sintéticas descritas en literatura [4], [5], [6], [7]. Paralelamente se realizará la caracterización estructural de los distintos intermedios sintéticos aislados.

Una vez sintetizado el receptor se ensayará su anclaje a nanotubos de carbono de pared múltiple mediante el mismo procedimiento empleado para carbones activados [8] desmostrando así, la posibilidad de extender este procedimiento a otros sólidos carbonosos.

7. BREVE DESCRIPCIÓN DE LAS ACTIVIDADES A REALIZAR

- Búsqueda bibliográfica de antecedentes
- Elaboración de un informe de antecedentes
- Caracterización de los productos de partida.
- Síntesis y caracterización estructural espectroscópica de los intermedios y producto final.
- Ensayos de adsorción del producto final sobre superficie de nanotubos de carbono de pared múltiple (MWCNT).
- Elaboración de la memoria de trabajo de fin de grado.
- Preparación y elaboración de la presentación para defensa del trabajo de fin de grado.

8. DOCUMENTACIÓN/BIBLIOGRAFÍA

- [1] María Ángeles Herranz, Nazario Martín; "Noncovalent Functionalization of Carbon Nanotubes" en *Carbon Nanotubes and Related Structures: Synthesis, Characterization, Functionalization, and Applications*. Dirk M. Guldi y Nazario Martín, eds. Wiley-VCH Verlag GmbH & Co, Weinheim, 2010. Págs. 103-134.
- [2] Rafael López-Garzón, M. Luz Godino-Salido, María D. Gutiérrez-Valero, Paloma Arranz-Mascarós, Manuel Melguizo, Celeste García, María Domingo-García, F. Javier López-Garzón; *Inorganica Chimica Acta* 2014, 417, 208–221.
- [3] Javier García-Martín, Rafaél López-Garzón, M. Luz Godino-Salido, M. Dolores Gutiérrez-Valero, Paloma Arranz-Mascarós, Rafael Cuesta-Martos, Francisco Carrasco-Marín; *Langmuir* 2005, 21 (12), 6908-6914.
- [4] Antonio Marchal, Manuel Nogueras, Adolfo Sánchez, John N. Low, Lieve Naesens, Erik De Clercq, y Manuel Melguizo; *Eur. J. Org. Chem.* 2010, 3823–3830.



UNIVERSIDAD DE JAÉN

- [5] Anne-Marie Albrecht-Gary, Sylvie Blanc, Frederic Biaso, Fabrice Thomas, Paul Baret, Gisele Gellon, Jean-Louis Pierre and Guy Serratrice; *Eur. J. Inorg. Chem.* 2003, 2596-2605.
- [6] Sunay V. Chankeshwara y Asit K. Chakraborti; *Organic Letters* 2006, 8 (15), 3259-3262.
- [7] Noha Ghanem, Jean Martinez y Didier Stien; *Tetrahedron Letters* 2002, 43, 1693–1695.
- [8] M. Dolores Gutiérrez-Valero, Paloma Arranz-Mascaró, Antonio Peñas-Sanjuán, M. Luz Godino-Salido, Rafael López-Garzón, Antonio Santiago-Medina, Manuel Melguizo-Guijarro, Manuel Pérez-Mendoza, F. Javier López-Garzón, María Domingo-García; *Mat. Chem. Phys.* 2012, 134, 608-615.

9. CRONOGRAMA PROVISIONAL

15 créditos: 375 horas

- Orientación y tutela individualizada: 50 horas
 - 42 horas (antecedentes y trabajo experimental)
 - 8 horas (informe/defensa)
- Trabajo autónomo del estudiante: 325 horas
 - Búsqueda de bibliografía y/o antecedentes: 14 horas
 - Trabajo experimental: 210 horas (15/semana)
 - Análisis de resultados y extracción de conclusiones: 56 horas
 - Elaboración del informe: 24 horas
 - Preparación de la defensa: 20 horas
 - Defensa: 1 hora

10. IMPLICACIONES ÉTICAS

El TFG requiere autorización de la Comisión de Ética: Sí No

En caso afirmativo, es preceptivo adjuntar la autorización del Comité de Bioética de la Universidad de Jaén o, en su defecto, la solicitud realizada a dicha Comisión.

Nota informativa: Para completar este Anexo II se recomienda consultar la guía docente de la asignatura del Trabajo Fin de Grado que está disponible en el siguiente enlace:

https://uvirtual.ujaen.es/pub/es/informacionacademica/catalogoguiasdocentes/p/2014-15/2/103A/10316001/es/2014-15-10316001_es.html

Más información: <http://www10.ujaen.es/conocenos/centros/facexp/trabajofingrado>

Anexo II

TITULACIÓN: Grado en Química
MEMORIA INICIAL DEL TRABAJO FIN DE GRADO
CENTRO: Facultad de Ciencias Experimentales
CURSO ACADÉMICO: 2014-15



UNIVERSIDAD DE JAÉN
Facultad de Ciencias Experimentales

Desarrollo de materiales poliméricos de alto valor añadido.

1. DATOS BÁSICOS DE LA ASIGNATURA

NOMBRE: Trabajo Fin de Grado

CÓDIGO: 10316001

CARÁCTER: Obligatorio

Créditos ECTS: 15

CURSO:Cuarto

CUATRIMESTRE: Segundo

2. TUTOR/COTUTOR(en su caso)

Dr. Manuel Melguizo Guijarro, por la Facultad de Ciencias Experimentales de la Universidad de Jaén.

Dr. Antonio Peñas Sanjuán, por la empresa Andaltec, Centro Tecnológico del Plástico.

3. VARIANTE Y TIPO DE TRABAJO FIN DE GRADO (Artículo 8 del Reglamento de los Trabajos Fin de Grado)

Específico. Experimental.



UNIVERSIDAD DE JAÉN

4. COMPETENCIAS (*) Y RESULTADOS DE APRENDIZAJE

Competencias transversales:

- B1. Capacidad de análisis y síntesis.
- B2. Capacidad de organización y planificación.
- B3. Comunicación oral y escrita en la lengua nativa.
- B4. Conocimiento de una lengua extranjera (preferiblemente inglés).
- B5. Capacidad para la gestión de datos y la generación de información/ conocimiento mediante el uso de las nuevas tecnologías de información y comunicación.
- B6. Resolución de problemas.
- B7. Capacidad de adaptarse a nuevas situaciones y toma de decisiones.
- B8. Trabajo en equipo.
- B9. Razonamiento crítico.
- B10. Capacidad de aprendizaje autónomo para el desarrollo continuo profesional.
- B11. Sensibilidad hacia temas medioambientales.
- B12. Compromiso ético.
- B13. Iniciativa y espíritu emprendedor.

Competencias Generales:

- P1. Habilidad para manipular con seguridad materiales químicos, teniendo en cuenta sus propiedades físicas y químicas, incluyendo cualquier peligro específico asociado con su uso.
- P2. Habilidad para llevar a cabo procedimientos estándares de laboratorio implicados en trabajos analíticos y sintéticos, en relación con sistemas orgánicos e inorgánicos.
- P3. Habilidad para la observación, seguimiento y medida de propiedades, eventos o cambios químicos, y el registro sistemático y fiable de la documentación correspondiente.
- P4. Habilidad para manejar instrumentación química estándar, como la que se utiliza para investigaciones estructurales y separaciones.
- P5. Interpretación de datos procedentes de observaciones y medidas en el laboratorio en términos de su significación y de las teorías que la sustentan.
- P6. Capacidad para realizar valoraciones de riesgos relativos al uso de sustancias químicas y procedimientos de laboratorio.
- Q1. Capacidad para demostrar el conocimiento y comprensión de los hechos esenciales, conceptos, principios y teorías relacionadas con la Química.
- Q2. Capacidad de aplicar dichos conocimientos a la resolución de problemas cualitativos y cuantitativos según modelos previamente desarrollados.
- Q3. Competencia para evaluar, interpretar y sintetizar datos e información Química.
- Q4. Capacidad para reconocer y llevar a cabo buenas prácticas en el trabajo científico.
- Q5. Competencia para presentar, tanto en forma escrita como oral, material y argumentación científica a una audiencia especializada.
- Q6. Destreza en el manejo y procesado informático de datos e información química

Competencias Específicas:

* Estas son las competencias mínimas. Añadir las competencias necesarias para cada Trabajo Fin de Grado propuesto

Resultados de aprendizaje

**Resultado
311003D**

Capacidad de integrar creativamente sus conocimientos para resolver un problema químico real.

Resultado 311003E	Capacidad para estructurar una defensa sólida de los puntos de vista personales apoyándose en conocimientos científicos bien fundados.
Resultado 311003F	Destreza en la elaboración de informes científicos complejos, bien estructurados y bien redactados.
Resultado 311003G	Destreza en la presentación oral de un trabajo, utilizando los medios audiovisuales más habituales.

5. ANTECEDENTES

Las investigaciones llevadas a cabo sobre nuevos materiales han sido en gran medida las responsables en las últimas décadas de importantes saltos tecnológicos que han supuesto un antes y un después en diversos campos de aplicación, mostrando así, que los esfuerzos en investigación y desarrollo son indispensables para el desarrollo de multitud de disciplinas científicas y técnicas. En este sentido, los materiales poliméricos han jugado un papel fundamental en los últimos años, dando lugar a multitud de investigaciones que han proporcionado materiales más económicos, con mejores propiedades (térmicas, eléctricas, mecánicas, etc.) o más eficientes y versátiles.

En particular, los composites y los blends plásticos, han propiciado un enorme progreso en el desarrollo de nuevos materiales avanzados (1). Los composites consisten en materiales poliméricos a los cuales se les añade otro compuesto como por ejemplo: fibra de vidrio, fibra de carbono, fibras naturales, talcos, grafito, nanopartículas, grafeno, entre otros. Por otro lado, los blends son básicamente mezclas de polímeros que se realizan con el fin de obtener materiales que presenten unas propiedades más ventajosas que las de los polímeros que los componen por separado (2)(3)(4).

De este modo los materiales compuestos y los blends son hoy día un punto fuerte de inversión en todos los sentidos (tiempo, talento y dinero) para empresas y grupos de investigación, interés motivado por el enorme potencial y aplicabilidad de los mismos. Así, tales materiales poliméricos han experimentado un gran auge en los últimos años, teniendo como grandes exponentes de aplicación la fabricación del Boeing 787 y el Airbus A380, donde los materiales poliméricos han sustituido a materiales más pesados no reforzados (5). Sin embargo, estos materiales poliméricos presentan algunas limitaciones en ciertas aplicaciones, como consecuencia de problemas de delaminación, micro-roturas o problemas de compatibilidad entre fases, que pueden mermar sus propiedades y forzar su reparación manual o su sustitución. En estas limitaciones es donde radica la importancia del desarrollo de nuevos materiales plásticos con especificaciones técnicas concretas y de alta eficiencia.

6. HIPÓTESIS DE TRABAJO

Mediante la ejecución de este proyecto se pretenden desarrollar materiales poliméricos de alto valor añadido que presenten las propiedades y especificaciones técnicas requeridas para determinadas aplicaciones previamente definidas en el proyecto.

Este trabajo consistirá en el estudio, análisis y empleo de diversas estrategias y metodologías de obtención de blends y composites mediante aditivación de materiales poliméricos. Esto requerirá de diversas metodologías en función de la naturaleza del polímero así como de la propiedad que se quiera mejorar. El desarrollo de tal trabajo y la consecución de los objetivos planteados en el mismo con lleva el empleo de multitud de técnicas de análisis y caracterización estructural.

7. BREVE DESCRIPCIÓN DE LAS ACTIVIDADES A REALIZAR

Las actividades que se pretenden desarrollar en la ejecución de este trabajo son las que se describen a continuación:

- 1 Caracterización estructural e identificación de materiales poliméricos de diversa naturaleza. Atendiendo a las necesidades de los trabajos que se realicen se tendrán que analizar y caracterizar materiales plásticos con objetivo de determinar su estructura química.
- 2 Análisis de las especificaciones técnicas que requieren cada uno de los materiales para aplicaciones definidas.
- 3 Estudio de antecedentes bibliográficos y evaluación de las metodologías de aditivación de matrices poliméricas más apropiadas atendiendo a las especificaciones técnicas requeridas por el material a desarrollar.
- 4 Desarrollo de composites y blends de base polimérica a escala de laboratorio y evaluación de sus propiedades mecánicas y químico-físicas.
- 5 Desarrollo de composites y blends de base polimérica a escala piloto mediante tecnologías de procesamiento de plásticos (inyección y extrusión). Evaluación de sus propiedades mecánicas y químico-físicas.
- 6 Evaluación de las propiedades del producto final obtenido y evaluación de las posibles estrategias a seguir.
- 7 Elaboración de una memoria final.
- 8 Elaboración de una presentación para defensa del trabajo.

La mayoría de estas tareas se realizarán en las instalaciones que ANDALTEC, Centro Tecnológico del Plástico, tiene en la ciudad de Martos (Jaén).

8. DOCUMENTACIÓN/BIBLIOGRAFÍA

- (1) P. Park, S. C. Zimmerman, *J. Am. Chem. Soc.* **2006**, *128*, 11582.
- (2) Y. S. Lipatov, *Prog. Polym. Sci.* **2002**, *27*, 1721.
- (3) J. K. Kim, J. Jang, D. H. Lee, D. Y. Ryu, *Macromolecules*, **2004**, *37*,8599
- (4) K. A. Rosentrater, *Advances in Materials Science Research*, **2012**, *5*, 109-125 |
- (5) C. S. Joshi, S. Zhang, D. Zhao, *Aerospace Materials Handbook*, **2013**, 461-492

9. CRONOGRAMA PROVISIONAL

Actividad	Meses					
	1	2	3	4	5	6
Hito 1. Estudio de requerimientos/especificaciones técnicas de los nuevos materiales termoplásticos a desarrollar						
Tarea 1.1. Estudio de necesidades y requerimientos técnicos de los materiales a desarrollar						
Tarea 1.2. Evaluación de los procedimientos y metodologías de obtención de los materiales objeto de estudio						
Hito 2. Ensayos a escala de laboratorio						
Tarea 2.1. Obtención y procesado de los nuevos materiales poliméricos						
Tarea 2.2. Evaluación de las propiedades mecánicas y químico-físicas de los materiales obtenidos.						
Hito 3. Ensayos a escala piloto						
Tarea 3.1. Obtención y procesado de los nuevos materiales poliméricos						
Tarea 3.2. Evaluación de las propiedades mecánicas y químico-físicas de los materiales obtenidos.						
Hito 4. Evaluación de resultados y propiedades de producto						
Tarea 4.1. Análisis de las especificaciones técnicas exigibles al producto final obtenido						
Elaboración de la memoria final y presentación para la defensa						

10. IMPLICACIONES ÉTICAS

El TFG requiere autorización de la Comisión de Ética: Sí No

En caso afirmativo, es preceptivo adjuntar la autorización del Comité de Bioética de la Universidad de Jaén o, en su defecto, la solicitud realizada a dicha Comisión.

Nota informativa: Para completar este Anexo II se recomienda consultar la guía docente de la asignatura del Trabajo Fin de Grado que está disponible en el siguiente enlace:

https://uvirtual.ujaen.es/pub/es/informacionacademica/catalogoquiadocentes/p/2012-13/2/103A/10316001/es/2012-13-10316001_es.html

Más información: <http://www10.ujaen.es/conocenos/centros/facexp/trabajofingrado>

Anexo II

TITULACIÓN: Grado en Química

MEMORIA INICIAL DEL TRABAJO FIN DE GRADO

CENTRO: Facultad de Ciencias Experimentales

CURSO ACADÉMICO: 2014-15



UNIVERSIDAD DE JAÉN
Facultad de Ciencias Experimentales

Preparación de películas conductoras transparentes basadas en materiales de carbón.

1. DATOS BÁSICOS DE LA ASIGNATURA

NOMBRE: Trabajo Fin de Grado

CÓDIGO: 10316001

CARÁCTER: Obligatorio

Créditos ECTS: 15

CURSO:Cuarto

CUATRIMESTRE: Segundo

2. TUTOR/COTUTOR(en su caso)

Dra. María Dolores López de la Torre.

Dr. Manuel Melguizo Guijarro.

3. VARIANTE Y TIPO DE TRABAJO FIN DE GRADO (Artículo 8 del Reglamento de los Trabajos Fin de Grado)

Específico. Experimental.



UNIVERSIDAD DE JAÉN

4. COMPETENCIAS (*) Y RESULTADOS DE APRENDIZAJE

Competencias transversales:

- B1. Capacidad de análisis y síntesis.
- B2. Capacidad de organización y planificación.
- B3. Comunicación oral y escrita en la lengua nativa.
- B4. Conocimiento de una lengua extranjera (preferiblemente inglés).
- B5. Capacidad para la gestión de datos y la generación de información/ conocimiento mediante el uso de las nuevas tecnologías de información y comunicación.
- B6. Resolución de problemas.
- B7. Capacidad de adaptarse a nuevas situaciones y toma de decisiones.
- B8. Trabajo en equipo.
- B9. Razonamiento crítico.
- B10. Capacidad de aprendizaje autónomo para el desarrollo continuo profesional.
- B11. Sensibilidad hacia temas medioambientales.
- B12. Compromiso ético.
- B13. Iniciativa y espíritu emprendedor.

Competencias Generales:

- P1. Habilidad para manipular con seguridad materiales químicos, teniendo en cuenta sus propiedades físicas y químicas, incluyendo cualquier peligro específico asociado con su uso.
- P2. Habilidad para llevar a cabo procedimientos estándares de laboratorio implicados en trabajos analíticos y sintéticos, en relación con sistemas orgánicos e inorgánicos.
- P3. Habilidad para la observación, seguimiento y medida de propiedades, eventos o cambios químicos, y el registro sistemático y fiable de la documentación correspondiente.
- P4. Habilidad para manejar instrumentación química estándar, como la que se utiliza para investigaciones estructurales y separaciones.
- P5. Interpretación de datos procedentes de observaciones y medidas en el laboratorio en términos de su significación y de las teorías que la sustentan.
- P6. Capacidad para realizar valoraciones de riesgos relativos al uso de sustancias químicas y procedimientos de laboratorio.
- Q1. Capacidad para demostrar el conocimiento y comprensión de los hechos esenciales, conceptos, principios y teorías relacionadas con la Química.
- Q2. Capacidad de aplicar dichos conocimientos a la resolución de problemas cualitativos y cuantitativos según modelos previamente desarrollados.
- Q3. Competencia para evaluar, interpretar y sintetizar datos e información Química.
- Q4. Capacidad para reconocer y llevar a cabo buenas prácticas en el trabajo científico.
- Q5. Competencia para presentar, tanto en forma escrita como oral, material y argumentación científica a una audiencia especializada.
- Q6. Destreza en el manejo y procesado informático de datos e información química

Competencias Específicas:

* Estas son las competencias mínimas. Añadir las competencias necesarias para cada Trabajo Fin de Grado propuesto

Resultados de aprendizaje

**Resultado
311003D**

Capacidad de integrar creativamente sus conocimientos para resolver un problema químico real.

Resultado 311003E	Capacidad para estructurar una defensa sólida de los puntos de vista personales apoyándose en conocimientos científicos bien fundados.
Resultado 311003F	Destreza en la elaboración de informes científicos complejos, bien estructurados y bien redactados.
Resultado 311003G	Destreza en la presentación oral de un trabajo, utilizando los medios audiovisuales más habituales.

5. ANTECEDENTES

Los materiales que reúnen la cualidades de ser conductores y tener alta transparencia (conductores transparentes, CT) constituyen elementos fundamentales en el desarrollo de tecnologías y aplicaciones optoelectrónicas como pantallas táctiles, dispositivos de iluminación, sensores de luz o células fotovoltaicas [1] {{1575 Ho,Xinning 2013;}}. De entre los TC conocidos, el óxido de indio y estaño (ITO, por sus siglas en inglés, *Indium Tin Oxide*) es el material que se emplea para las aplicaciones ya desarrolladas. Sin embargo, el ITO es un material caro debido a los problemas derivados de la escasez del Indio y a los costes elevados de los procesos de deposición de este material sobre sus soportes. De este modo, la falta de CT basados en elementos abundantes y fáciles de preparar constituyen un cuello de botella que está impidiendo el desarrollo y la expansión de nuevas tecnologías, algunas de ellas estratégicas como las células solares plásticas, cuya menor vida útil hace económicamente inviable el empleo de materiales caros como el ITO [2] {{1573 Layani,Michael 2014;}} [3] {{1576 Angmo,Dechan 2013;}}.

De todo lo anterior se deriva el interés actual en el desarrollo de nuevos materiales CT con mayor disponibilidad y costes más bajos. En este sentido, los CT basados en nanoestructuras de carbono, como los nanotubos de carbono de pared simple o las láminas de grafeno, constituyen una aproximación prometedora, puesto que se ha demostrado la construcción de películas delgadas de nanotubos de carbono con excelente conductividad y muy alta transparencia [4] {{1572 Lv,Ruitao 2014;}}.

Por otra parte, nuestro grupo de investigación ha trabajado durante los últimos años en la funcionalización específica de materiales de base carbonosa empleando un modelo de enlace no-covalente entre las funciones y las superficies grafénicas, con unos resultados excelentes en cuanto a estabilidad y densidad superficial de la funcionalización introducida [5] {{1586 López-Garzón,Rafael 2014;}}.

En este trabajo se pretende aplicar este modelo de funcionalización no-covalente para conseguir el anclaje de nanotubos de carbono de pared simple sobre superficies de vidrio que, en una etapa previa, han sido convenientemente funcionalizadas mediante técnicas bien establecidas [6] {{1583 Kamisetty,NagendraKumar 2006;}}. Se espera que el anclaje de lugar a películas delgadas de material de base grafénica con alta conductividad y transparencia óptica.

6. HIPÓTESIS DE TRABAJO

Las hipótesis en que se fundamente este trabajo son:

1. Se puede funcionalizar superficies de vidrio con funciones capaces de establecer interacciones “pi-pi” con láminas grafénicas.
2. Una vez funcionalizada, la superficie del vidrio presentará afinidad por los materiales de base grafénica, que podrán enlazarse por vía no-covalente y formar películas delgadas sobre la superficie del vidrio.
3. Las láminas delgadas formadas sobre la superficie del vidrio tendrán propiedades conductoras y alta transparencia.



UNIVERSIDAD DE JAÉN

7. BREVE DESCRIPCIÓN DE LAS ACTIVIDADES A REALIZAR

1. Búsqueda y organización de literatura.
2. Funcionalización primaria de superficies de vidrio.
3. Modificación de la funcionalización para adaptarla a la formación de enlaces "pi-pi" con superficies graénica.
4. Ensayo de retención de nanotubos de carbono en la superficie del vidrio.
5. Elaboración de la memoria de trabajo de fin de grado.
6. Elaboración de la presentación para defensa del trabajo de fin de grado.

8. DOCUMENTACIÓN/BIBLIOGRAFÍA

[1] Ho X, Wei J. Films of carbon nanomaterials for transparent conductors. *Materials* 2013;6:2155-81.

[2] Layani M, Kamyshny A, Magdassi S. Transparent conductors composed of nanomaterials. *Nanoscale* 2014;6:5581-91.

[3] Angmo D, Krebs FC. Flexible ITO-free polymer solar cells. *J Appl Polym Sci* 2013;129:1-14.

[4] Lv R, Cruz-Silva E, Terrones M. Building Complex Hybrid Carbon Architectures by Covalent Interconnections: Graphene-Nanotube Hybrids and More. *ACS Nano* 2014;8:4061-9.

[5] López-Garzón R, Godino-Salido ML, Gutiérrez-Valero MD, Arranz-Mascarós P, Melguizo M, García C et al. Supramolecular assembling of molecular ion-ligands on graphite-based solid materials directed to specific binding of metal ions. *Inorg Chim Acta* 2014;417:208-21.

[6] Kamisetty N, Pack S, Nonogawa M, Devarayapalli K, Kodaki T, Makino K. Development of an efficient amine-functionalized glass platform by additional silanization treatment with alkylsilane. *Analytical and Bioanalytical Chemistry* 2006;386:1649-55.

9. CRONOGRAMA PROVISIONAL

15 créditos: 375 horas

- Orientación y tutela individualizada: 50 horas
 - 42 horas (antecedentes y trabajo experimental)
 - 8 horas (informe/defensa)
- Trabajo autónomo del estudiante: 325 horas
 - Búsqueda de bibliografía y/o antecedentes: 14 horas
 - Trabajo experimental: 210 horas (15/semana)
 - Análisis de resultados y extracción de conclusiones: 56 horas
 - Elaboración del informe: 24 horas
 - Preparación de la defensa: 20 horas
 - Defensa: 1 hora



10. IMPLICACIONES ÉTICAS

El TFG requiere autorización de la Comisión de Ética: Sí No

En caso afirmativo, es preceptivo adjuntar la autorización del Comité de Bioética de la Universidad de Jaén o, en su defecto, la solicitud realizada a dicha Comisión.

Nota informativa: Para completar este Anexo II se recomienda consultar la guía docente de la asignatura del Trabajo Fin de Grado que está disponible en el siguiente enlace:

https://uvirtual.ujaen.es/pub/es/informacionacademica/catalogoguiasdocentes/p/2014-15/2/103A/10316001/es/2014-15-10316001_es.html

Más información: <http://www10.ujaen.es/conocenos/centros/facep/trabajofingrado>

Anexo II

TITULACIÓN: Grado en Química

MEMORIA INICIAL DEL TRABAJO FIN DE GRADO

CENTRO: Facultad de Ciencias Experimentales

CURSO ACADÉMICO: 2014-15



UNIVERSIDAD DE JAÉN
Facultad de Ciencias Experimentales

Título del Trabajo Fin de Grado:

Retos y oportunidades de un/una graduado/a en Química en...

- a) el sector cosmético.
- b) el sector sanitario.
- c) el sector energético.
- d) el sector agroalimentario.
- e) el sector textil.
- f) el sector de la automoción.
- g) la conservación del medio medioambiente.
- h) la restauración y la conservación del patrimonio histórico.
- i) la lucha contra las alergias.
- j) la lucha contra el cáncer.
- k) la lucha contra las enfermedades dermatológicas.
- l) la lucha contra las enfermedades digestivas.
- m) la lucha contra las enfermedades ginecológicas.
- n) la lucha contra las enfermedades infecciosas.
- o) la lucha contra las enfermedades musculares y óseas.
- p) la lucha contra las enfermedades neurológicas.
- q) la lucha contra las enfermedades oftalmológicas.
- r) la lucha contra las enfermedades psiquiátricas.
- s) la lucha contra las enfermedades raras.
- t) la lucha contra las enfermedades respiratorias.
- u) la lucha contra las enfermedades urológicas.
- v) la lucha contra las enfermedades vasculares y del corazón.

1. DATOS BÁSICOS DE LA ASIGNATURA

NOMBRE: Trabajo Fin de Grado

CÓDIGO: 10416001

CARÁCTER: Obligatorio

Créditos ECTS: 15

CURSO:Cuarto

CUATRIMESTRE: Segundo

2. TUTOR/COTUTOR(en su caso)

Antonio Marchal Ingrain



UNIVERSIDAD DE JAÉN

3. VARIANTE Y TIPO DE TRABAJO FIN DE GRADO (Artículo 8 del Reglamento de los Trabajos Fin de Grado)

General: Revisión e investigación bibliográfica

4. COMPETENCIAS (*) Y RESULTADOS DE APRENDIZAJE

Competencias transversales:

- B1. Capacidad de análisis y síntesis.
- B2. Capacidad de organización y planificación.
- B3. Comunicación oral y escrita en la lengua nativa.
- B4. Conocimiento de una lengua extranjera (preferiblemente inglés).
- B5. Capacidad para la gestión de datos y la generación de información/ conocimiento mediante el uso de las nuevas tecnologías de información y comunicación.
- B6. Resolución de problemas.
- B7. Capacidad de adaptarse a nuevas situaciones y toma de decisiones.
- B8. Trabajo en equipo.
- B9. Razonamiento crítico.
- B10. Capacidad de aprendizaje autónomo para el desarrollo continuo profesional.
- B11. Sensibilidad hacia temas medioambientales.
- B12. Compromiso ético.
- B13. Iniciativa y espíritu emprendedor.

Competencias Generales:

- P1. Habilidad para manipular con seguridad materiales químicos, teniendo en cuenta sus propiedades físicas y químicas, incluyendo cualquier peligro específico asociado con su uso.
- P2. Habilidad para llevar a cabo procedimientos estándares de laboratorio implicados en trabajos analíticos y sintéticos, en relación con sistemas orgánicos e inorgánicos.
- P3. Habilidad para la observación, seguimiento y medida de propiedades, eventos o cambios químicos, y el registro sistemático y fiable de la documentación correspondiente.
- P4. Habilidad para manejar instrumentación química estándar, como la que se utiliza para investigaciones estructurales y separaciones.
- P5. Interpretación de datos procedentes de observaciones y medidas en el laboratorio en términos de su significación y de las teorías que la sustentan.
- P6. Capacidad para realizar valoraciones de riesgos relativos al uso de sustancias químicas y procedimientos de laboratorio.
- Q1. Capacidad para demostrar el conocimiento y comprensión de los hechos esenciales, conceptos, principios y teorías relacionadas con la Química.
- Q2. Capacidad de aplicar dichos conocimientos a la resolución de problemas cualitativos y cuantitativos según modelos previamente desarrollados.
- Q3. Competencia para evaluar, interpretar y sintetizar datos e información Química.
- Q4. Capacidad para reconocer y llevar a cabo buenas prácticas en el trabajo científico.
- Q5. Competencia para presentar, tanto en forma escrita como oral, material y argumentación científica a una audiencia especializada.
- Q6. Destreza en el manejo y procesado informático de datos e información química

* Estas son las competencias mínimas. Añadir las competencias necesarias para cada Trabajo Fin de Grado propuesto

Resultados de aprendizaje

Resultado 311003D	Capacidad de integrar creativamente sus conocimientos para resolver un problema químico real.
Resultado 311003E	Capacidad para estructurar una defensa sólida de los puntos de vista personales apoyándose en conocimientos científicos bien fundados.
Resultado 311003F	Destreza en la elaboración de informes científicos complejos, bien estructurados y bien redactados.
Resultado 311003G	Destreza en la presentación oral de un trabajo, utilizando los medios audiovisuales más habituales.

5. ANTECEDENTES

La Química es la Ciencia que estudia la materia, sus transformaciones y aplicaciones. En los últimos cien años la Química ha permitido que la esperanza de vida se haya duplicado gracias a los avances conseguidos en campos tan diversos como la **alimentación** (aumento de cosechas gracias a los abonos, fertilizantes, plaguicidas, potabilización del agua, conservación, análisis de contaminantes) o la **sanidad** (desarrollo de nuevos medicamentos, quimioterapia, instrumentación médica, métodos diagnósticos, nuevas formas de administración de fármacos, etc.).

Por otro lado, el desarrollo de nuevas **técnicas instrumentales** y de **nuevos materiales**, más ligeros, resistentes y duraderos, nos está permitiendo:

- Desplazarnos y comunicarnos más cómoda, segura y rápidamente con menor gasto energético.
- Construir infraestructuras más confortables, seguras y ecoeficientes.
- Proteger y conocer nuestro pasado histórico.
- Mejorar nuestro aspecto (jabones, detergentes, colorantes, tejidos, cosméticos...)
- Disfrutar más y mejor de nuestro tiempo de ocio (dispositivos electrónicos, equipamientos deportivos, etc...)

No debemos olvidar sin embargo que ciertos compuestos químicos son también uno de los **principales problemas** a los que debemos enfrentarnos para **preservar el medio ambiente**, ya que si bien han mejorado considerablemente nuestra calidad de vida también son el origen de problemas medioambientales como:

- La **contaminación de suelos, ríos y mares** debido a **vertidos incontrolados**.
- La **destrucción de la capa de ozono**.
- La **acumulación** de bienes no degradables de un solo uso y baja vida útil.

6. HIPÓTESIS DE TRABAJO

En la **Química** y en sus **profesionales** (futuros/as graduados/as) se encuentra la solución a muchos de los problemas que acucian a la sociedad actual. Ocurre, sin embargo, que la mayoría de los estudiantes no son conscientes de este hecho y llegan al final del grado con un desconocimiento absoluto de los múltiples campos en los que pueden desarrollar su actividad laboral. Precisamente para ayudarles a clarificar su futuro surge la presente propuesta de Proyecto Fin de Grado consistente en la búsqueda de información sobre los retos y oportunidades de un/una graduado/a en Química y las empresas o instituciones en donde pueden encontrar esas oportunidades.

Puesto que los campos en los que un/a graduado/a en Química puede desarrollar su actividad laboral son muy diversos se propone que cada estudiante se centre y profundice en una o dos áreas de su especial interés.



UNIVERSIDAD DE JAÉN

7. BREVE DESCRIPCIÓN DE LAS ACTIVIDADES A REALIZAR

Seleccionadas por el/la estudiante sus áreas de interés, deberá buscar información detallada de las empresas, instituciones o grupos de investigación que trabajen en dichas áreas y, de los pasos a seguir (becas, contratos, prácticas, cursos de actualización y/o especialización) para iniciar su carrera profesional en alguna de estas empresas, instituciones o grupos.

Seguidamente, la información obtenida deberá ser analizada críticamente puesto que será la base de la Memoria de Trabajo Fin de Grado que deberá entregar, exponer y defender en la fecha que determine la Comisión del Trabajo Fin de Grado.

En esta búsqueda, el profesor-tutor realizará una labor de orientación actuando como agente dinamizador y facilitador del proceso de aprendizaje, siendo el estudiante elemento clave del sistema de formación.

8. DOCUMENTACIÓN/BIBLIOGRAFÍA

[1] Herradón, B. *Los avances de la química*, CSIC, Madrid, **2011**.

[2] Ecoiuris (Ed.) *Guía de las buenas prácticas ambientales*. Ariño y Asociados Abogados. **2004**.

[3] López Nieto, J. M. *La química verde*, CSIC, Madrid, **2011**.

[4] Orozco, C., Pérez, A., González, N., Rodríguez, F., Alfayate, J. *Contaminación ambiental. Una visión desde la química*, Thomson, Madrid, **2003**.

<http://www.andaluciainvestiga.com>

<http://www.aemps.gob.es/>

<http://www.ciemat.es/>

<http://www.consumer.es>

<http://www.csic.es/web/quest/areas-cientificas>

<http://www.dmedicina.com/enfermedades/>

<http://www.energias-renovables.com>

<http://www.enovaandalucia.es>

<http://www.fecyt.es/especiales/residuos/>

<http://www.iaph.es/web/>

<http://www.msssi.gob.es/>

<http://www.plataformasinc.es>

<http://pubs.acs.org/>

<http://www.redotriuniversidades.net/portal/>

<http://www.quimicaysociedad.org>

<http://www.sciencedirect.com>



UNIVERSIDAD DE JAÉN

9. CRONOGRAMA PROVISIONAL

2-8 febrero 2015: 1ª Sesión de Tutorización (1 h) donde se presentará al estudiante las diferentes temáticas a tratar y que pueden ser objeto de su TFG.

9-15 febrero 2015: 2ª Sesión de Tutorización (1 h) donde el estudiante elegirá las temáticas y se comentarán las fuentes bibliográficas y on line más apropiadas para optimizar la búsqueda de la información que debe llevar a cabo.

16 febrero-27 marzo 2015: TRABAJO AUTÓNOMO (210 h)

30 marzo-6 abril 2015: SEMANA SANTA

7-10 abril 2015: 3ª Sesión de Tutorización (1 h) donde se revisará y valorará el trabajo autónomo realizado por el alumno hasta la fecha y se le orientará sobre la realización y redacción de la Memoria final.

13-30 abril 2015: TRABAJO AUTONOMO (130 h)

4-8 mayo 2015: 4ª Sesión de Tutorización (1 h) donde se revisará la Memoria y se valorará el trabajo autónomo realizado por el alumno hasta la fecha.

11-17 mayo 2015: PREPARACION DE LA DEFENSA DEL TRABAJO FIN DE GRADO (29 h)

18-22 mayo 2015: 5ª Sesión de Tutorización (2 h) donde se revisará la Memoria FINAL y se asesorará sobre la Defensa del TFG.

Nota informativa: Para completar este Anexo II se recomienda consultar la guía docente de la asignatura del Trabajo Fin de Grado que está disponible en el siguiente enlace:

https://uvirtual.ujaen.es/srv/es/informacionacademica/catalogoguiasdocentes/p/2014-15/2/102A/10216001/es/2014-15-10216001_es.html

Más información:

<http://www10.ujaen.es/conocenos/centros/facexp/trabajofingrado>

Anexo II

TITULACIÓN: Grado en Química

MEMORIA INICIAL DEL TRABAJO FIN DE GRADO

CENTRO: Facultad de Ciencias Experimentales

CURSO ACADÉMICO: 2014-15



UNIVERSIDAD DE JAÉN
Facultad de Ciencias Experimentales

Título del Trabajo Fin de Grado: Funcionalización de materiales de carbón

1. DATOS BÁSICOS DE LA ASIGNATURA

NOMBRE: Trabajo Fin de Grado

CÓDIGO: 10316001

CARÁCTER: Obligatorio

Créditos ECTS: 15

CURSO:Cuarto

CUATRIMESTRE: Segundo

2. TUTOR/COTUTOR(en su caso)

M^a Luz Godino Salido

3. VARIANTE Y TIPO DE TRABAJO FIN DE GRADO (Artículo 8 del Reglamento de los Trabajos Fin de Grado)

**Específico
Experimental**



UNIVERSIDAD DE JAÉN

4. COMPETENCIAS (*) Y RESULTADOS DE APRENDIZAJE

Competencias transversales:

- B1. Capacidad de análisis y síntesis.
- B2. Capacidad de organización y planificación.
- B3. Comunicación oral y escrita en la lengua nativa.
- B4. Conocimiento de una lengua extranjera (preferiblemente inglés).
- B5. Capacidad para la gestión de datos y la generación de información/ conocimiento mediante el uso de las nuevas tecnologías de información y comunicación.
- B6. Resolución de problemas.
- B7. Capacidad de adaptarse a nuevas situaciones y toma de decisiones.
- B8. Trabajo en equipo.
- B9. Razonamiento crítico.
- B10. Capacidad de aprendizaje autónomo para el desarrollo continuo profesional.
- B11. Sensibilidad hacia temas medioambientales.
- B12. Compromiso ético.
- B13. Iniciativa y espíritu emprendedor.

Competencias Generales:

- P1. Habilidad para manipular con seguridad materiales químicos, teniendo en cuenta sus propiedades físicas y químicas, incluyendo cualquier peligro específico asociado con su uso.
- P2. Habilidad para llevar a cabo procedimientos estándares de laboratorio implicados en trabajos analíticos y sintéticos, en relación con sistemas orgánicos e inorgánicos.
- P3. Habilidad para la observación, seguimiento y medida de propiedades, eventos o cambios químicos, y el registro sistemático y fiable de la documentación correspondiente.
- P4. Habilidad para manejar instrumentación química estándar, como la que se utiliza para investigaciones estructurales y separaciones.
- P5. Interpretación de datos procedentes de observaciones y medidas en el laboratorio en términos de su significación y de las teorías que la sustentan.
- P6. Capacidad para realizar valoraciones de riesgos relativos al uso de sustancias químicas y procedimientos de laboratorio.
- Q1. Capacidad para demostrar el conocimiento y comprensión de los hechos esenciales, conceptos, principios y teorías relacionadas con la Química.
- Q2. Capacidad de aplicar dichos conocimientos a la resolución de problemas cualitativos y cuantitativos según modelos previamente desarrollados.
- Q3. Competencia para evaluar, interpretar y sintetizar datos e información Química.
- Q4. Capacidad para reconocer y llevar a cabo buenas prácticas en el trabajo científico.
- Q5. Competencia para presentar, tanto en forma escrita como oral, material y argumentación científica a una audiencia especializada.
- Q6. Destreza en el manejo y procesado informático de datos e información química

Competencias Específicas:

* Estas son las competencias mínimas. Añadir las competencias necesarias para cada Trabajo Fin de Grado propuesto

Resultados de aprendizaje

**Resultado
311003D**

Capacidad de integrar creativamente sus conocimientos para resolver un problema químico real.

Resultado 311003E	Capacidad para estructurar una defensa sólida de los puntos de vista personales apoyándose en conocimientos científicos bien fundados.
Resultado 311003F	Destreza en la elaboración de informes científicos complejos, bien estructurados y bien redactados.
Resultado 311003G	Destreza en la presentación oral de un trabajo, utilizando los medios audiovisuales más habituales.

5. ANTECEDENTES

Los materiales de carbón presentan un amplio espectro de aplicaciones debido a sus interesantes propiedades adsorbentes, catalíticas y tecnológicas [1-4]. Las diversas investigaciones llevadas a cabo en relación con este tipo de materiales han puesto de manifiesto que sus propiedades y aplicaciones dependen tanto de sus características texturales como de su química superficial [1, 2]. Desde hace décadas se han venido desarrollando diferentes métodos de funcionalización superficial de materiales de carbón con el objeto de mejorar sus propiedades [3-5]. Estos métodos se clasifican en dos grandes grupos:

- métodos de funcionalización covalente, mediante los que las funciones se fijan a través de enlaces más fuertes al soporte pero que con frecuencia modifican las propiedades intrínsecas del material de partida, y
- métodos de funcionalización no covalente, mediante los que las funciones se fijan en el soporte a través de enlaces menos fuertes pero que normalmente no modifican las propiedades intrínsecas del mismo.

6. HIPÓTESIS DE TRABAJO

De acuerdo con los antecedentes del apartado 5, el desarrollo de nuevos métodos de funcionalización de materiales de carbón es un tema de gran actualidad, por lo que en el presente trabajo se plantea revisar en detalle los métodos de funcionalización descritos en bibliografía para diferentes materiales de carbón, entre los que destacan por sus propiedades materiales relativamente novedosos como los nanotubos de carbono y el grafeno, y otros no tan novedosos, pero que resultan interesantes tanto desde el punto de vista económico como por sus aplicaciones, como pueden ser los carbones activos. Tras dicha revisión el alumno o alumna, con los medios y reactivos que encuentre disponibles en el laboratorio deberá de diseñar y desarrollar la funcionalización de un material de carbón, y realizar su caracterización con el fin de confirmar que la funcionalización se ha llevado a cabo de forma satisfactoria.

7. BREVE DESCRIPCIÓN DE LAS ACTIVIDADES A REALIZAR

- Revisión bibliográfica
- Análisis de la hipótesis de trabajo
- Diseño del método de funcionalización de un material de carbón
- Desarrollo del método diseñado
- Caracterización del material funcionalizado
- Análisis, interpretación y discusión de los resultados
- Redacción de la memoria del Trabajo Fin de Grado
- Preparación de la defensa del Trabajo Fin de Grado

8. DOCUMENTACIÓN/BIBLIOGRAFÍA

- [1] R. C. Bansal. Activated carbon adsorption. Dekker/CRC Press, cop., Boca Raton, **2005**.
- [2] P. Serp, J. L. Figueiredo (Ed.). Carbon materials for catalysis. John Wiley & Sons, Inc., Hoboken, New Jersey, **2009**.
- [3] D. M. Guldi, N. Martín (Ed). Carbon nanotubes and related structures. Wiley-VCH, **2010**.
- [4] W. Wei, X. Qu. Extraordinary physical properties of functionalized graphene. Small, **2012**, 8, 2138-2151.
- [5] V. Georgakilas, M. Otyepka, A. B. Bourlinos, V. Chandra, N. Kim, K. C. Kemp, P. Hobza, R. Zboril, K. S. Kim. Functionalization of Graphene: Covalent and non-covalent approaches, derivatives and applications. Chem. Rev. **2012**, 112, 6156-6214.

9. CRONOGRAMA PROVISIONAL

- Revisión bibliográfica: 70 horas
- Análisis de la hipótesis de trabajo: 5 horas
- Diseño del método de funcionalización de un material de carbón: 10 horas
- Desarrollo del método diseñado: 75 horas
- Caracterización del material funcionalizado: 75 horas
- Análisis, interpretación y discusión de los resultados: 35 horas
- Redacción de la memoria del Trabajo Fin de Grado: 75 horas
- Preparación de la defensa del Trabajo Fin de Grado: 30 horas

10. IMPLICACIONES ÉTICAS

El TFG requiere autorización de la Comisión de Ética: Sí No

En caso afirmativo, es preceptivo adjuntar la autorización del Comité de Bioética de la Universidad de Jaén o, en su defecto, la solicitud realizada a dicha Comisión.

Nota informativa: Para completar este Anexo II se recomienda consultar la guía docente de la asignatura del Trabajo Fin de Grado que está disponible en el siguiente enlace:

https://uvirtual.ujaen.es/pub/es/informacionacademica/catalogoguiasdocentes/p/2014-15/2/103A/10316001/es/2014-15-10316001_es.html

Más información: <http://www10.ujaen.es/conocenos/centros/facexp/trabajofingrado>

Anexo II

TITULACIÓN: Grado en Química
MEMORIA INICIAL DEL TRABAJO FIN DE GRADO
CENTRO: Facultad de Ciencias Experimentales
CURSO ACADÉMICO: 2014-15



UNIVERSIDAD DE JAÉN
Facultad de Ciencias Experimentales

Título del Trabajo Fin de Grado:

1. DATOS BÁSICOS DE LA ASIGNATURA

NOMBRE: Eliminación de herbicidas del agua mediante adsorción, bajo condiciones estáticas y dinámicas, usando carbones activados

CÓDIGO: 10316001

CARÁCTER: Obligatorio

Créditos ECTS: 15

CURSO:Cuarto

CUATRIMESTRE: Segundo

2. TUTOR/COTUTOR(en su caso)

Miguel Ángel Álvarez Merino/María Victoria López Ramón

3. VARIANTE Y TIPO DE TRABAJO FIN DE GRADO (Artículo 8 del Reglamento de los Trabajos Fin de Grado)

Específico



UNIVERSIDAD DE JAÉN

4. COMPETENCIAS (*) Y RESULTADOS DE APRENDIZAJE

Competencias transversales:

- B1. Capacidad de análisis y síntesis.
- B2. Capacidad de organización y planificación.
- B3. Comunicación oral y escrita en la lengua nativa.
- B4. Conocimiento de una lengua extranjera (preferiblemente inglés).
- B5. Capacidad para la gestión de datos y la generación de información/ conocimiento mediante el uso de las nuevas tecnologías de información y comunicación.
- B6. Resolución de problemas.
- B7. Capacidad de adaptarse a nuevas situaciones y toma de decisiones.
- B8. Trabajo en equipo.
- B9. Razonamiento crítico.
- B10. Capacidad de aprendizaje autónomo para el desarrollo continuo profesional.
- B11. Sensibilidad hacia temas medioambientales.
- B12. Compromiso ético.
- B13. Iniciativa y espíritu emprendedor.

Competencias Generales:

- P1. Habilidad para manipular con seguridad materiales químicos, teniendo en cuenta sus propiedades físicas y químicas, incluyendo cualquier peligro específico asociado con su uso.
- P2. Habilidad para llevar a cabo procedimientos estándares de laboratorio implicados en trabajos analíticos y sintéticos, en relación con sistemas orgánicos e inorgánicos.
- P3. Habilidad para la observación, seguimiento y medida de propiedades, eventos o cambios químicos, y el registro sistemático y fiable de la documentación correspondiente.
- P4. Habilidad para manejar instrumentación química estándar, como la que se utiliza para investigaciones estructurales y separaciones.
- P5. Interpretación de datos procedentes de observaciones y medidas en el laboratorio en términos de su significación y de las teorías que la sustentan.
- P6. Capacidad para realizar valoraciones de riesgos relativos al uso de sustancias químicas y procedimientos de laboratorio.
- Q1. Capacidad para demostrar el conocimiento y comprensión de los hechos esenciales, conceptos, principios y teorías relacionadas con la Química.
- Q2. Capacidad de aplicar dichos conocimientos a la resolución de problemas cualitativos y cuantitativos según modelos previamente desarrollados.
- Q3. Competencia para evaluar, interpretar y sintetizar datos e información Química.
- Q4. Capacidad para reconocer y llevar a cabo buenas prácticas en el trabajo científico.
- Q5. Competencia para presentar, tanto en forma escrita como oral, material y argumentación científica a una audiencia especializada.
- Q6. Destreza en el manejo y procesado informático de datos e información química

Competencias Específicas:

* Estas son las competencias mínimas. Añadir las competencias necesarias para cada Trabajo Fin de Grado propuesto

Resultados de aprendizaje

**Resultado
311003D**

Capacidad de integrar creativamente sus conocimientos para resolver un problema químico real.



UNIVERSIDAD DE JAÉN

Resultado 311003E	Capacidad para estructurar una defensa sólida de los puntos de vista personales apoyándose en conocimientos científicos bien fundados.
Resultado 311003F	Destreza en la elaboración de informes científicos complejos, bien estructurados y bien redactados.
Resultado 311003G	Destreza en la presentación oral de un trabajo, utilizando los medios audiovisuales más habituales.

5. ANTECEDENTES

Las Agencias de Protección del Medioambiente, europeas y americanas, (www.epa.gov) consideran que el proceso de adsorción de contaminantes en carbón activado es una de las mejores tecnologías de control disponibles para el tratamiento de aguas con estos contaminantes; sin embargo, en la mayoría de los estudios relacionados con este campo se han ignorado los efectos de la química y física de la superficie del carbón en la eliminación de los contaminantes de las aguas [1]. Así, se conoce muy poco acerca de los diferentes mecanismos que controlan estos procesos; por ello, un estudio profundo de los parámetros que influyen en un determinado proceso de adsorción contribuye a aumentar la efectividad en la eliminación de un determinado contaminante. El problema fundamental del uso de herbicidas en zonas agrícolas no es en si el uso de estos, sino los problemas derivados del uso abusivo e incontrolado de estos en la agricultura. Entre los problemas más frecuentes están la contaminación de aguas subterráneas (acuíferos y pantanos), la eutrofización, problemas de salud pública por toxicidad de estos productos fitosanitarios, etc. Por lo tanto, el número de herbicidas encontrados en las aguas se ha ido incrementado de forma constante. El límite máximo de herbicidas permitido en el agua potable (UE Directiva 98/83/CE) es de 0,1 $\mu\text{g/L}$, pero en algunas ocasiones se han detectado concentraciones más altas y se han producido graves episodios de contaminación. El uso de adsorbentes de materiales de carbón avanzados como son telas y fibras de carbón activado tienen ciertas ventajas sobre los materiales clásicos de carbón (carbones activados granulares y en polvo). Entre éstas se pueden citar la facilidad de preparación de columnas adsorbentes, una cinética de adsorción más rápida, una mayor capacidad de adsorción, y la facilidad de tratar grandes flujos de aguas contaminadas [2,3]. Nuestro grupo de investigación tiene una amplia experiencia en la preparación y caracterización físico-química de carbones activados, así como en el estudio de la adsorción en disolución acuosa de moléculas orgánicas en materiales de carbón [4-10].

6. HIPÓTESIS DE TRABAJO

Se pretende establecer estrategias de tratamiento óptimas en cuanto a eficacia/coste y poder plantear posibles vías de reutilización de las aguas contaminadas. Así se analizará la viabilidad de nuevos materiales de carbón como adsorbentes de herbicidas en aguas agrícolas. Para ello, los procesos de adsorción se llevarán a cabo tanto en régimen estático como dinámico, determinando la capacidad de adsorción de los mismos. Los resultados obtenidos, en todos los casos, se relacionarán con las características texturales y grupos químicos superficiales de los materiales de carbón. Se estudiarán: la influencia de las variables operacionales, cinética del proceso y mecanismos que controlan estos procesos, con el fin de aumentar la efectividad de los mismos en la extracción de estos contaminantes de las aguas residuales. Esto daría lugar a un importante ahorro en el consumo de agua que, junto con la eliminación de los contaminantes, sería muy beneficioso desde el punto de vista de la protección del medio ambiente.

7. BREVE DESCRIPCIÓN DE LAS ACTIVIDADES A REALIZAR

- Revisión bibliográfica y análisis de la misma.
- Estudio de la cinética de adsorción de los herbicidas seleccionados.
- Estudio de las isotermas de adsorción en función del tipo de adsorbente, química de la disolución y temperatura de adsorción.
- Estudio en régimen dinámico de la adsorción de los herbicidas en las condiciones más favorables determinadas en régimen estático.
- Análisis, interpretación y discusión de los resultados.
- Preparación de la memoria y exposición del Trabajo Fin de Grado.

8. DOCUMENTACIÓN/BIBLIOGRAFÍA

- [1] L. R. Radovic, C. Moreno Castilla, J. Rivera Utrilla. "Carbon materials as adsorbents in aqueous solutions", in Chemistry and Physics of Carbon, Vol. 27, pp.227-405, Marcel Dekker, New York (2001).
- [2] C. Brasquet, P. Le Cloiret. Carbon 35, 1307, 1997.
- [3] L. L. Patricia, A. Quilivan, D.R.U. Knappe. Carbon 40, 2085, 2002.
- [4] J. Rivera Utrilla, E. Utrera Hidalgo, M.A. Ferro García, C. Moreno Castilla. Carbon 29, 613, 1991.
- [5] M.V. López Ramón, C. Moreno Castilla, J. Rivera Utrilla, R. Hidalgo. Carbon 31, 815, 1993.
- [6] C. Moreno Castilla, F. Carrasco Marín, M. V. López Ramón, M. A. Álvarez Merino. Carbon 39, 1415, 2001.
- [7] F. Stoeckli, M. V. López Ramón, C. Moreno Castilla. Langmuir 17, 3301, 2001.
- [8] E. Fernández, D. Hugi Cleary, M. V. López Ramón, F. Stoeckli. Langmuir 19, 9719, 2003.
- [9] M. A. Fontecha Cámara, M. V. López Ramón, M. A. Álvarez Merino, C. Moreno Castilla. Langmuir, 23, 1242, 2007.
- [10] L. M. Pastrana Martínez, M. V. López Ramón, M. A. Fontecha Cámara, C. Moreno Castilla. Water Research 44, 879, 2010.

9. CRONOGRAMA PROVISIONAL

1. Revisión bibliográfica y análisis de la misma: 40 h
2. Estudio de la cinética de adsorción de los contaminantes del agua: 50 h.
3. Estudio de las isotermas de adsorción en función del tipo de adsorbente, química de la disolución y temperatura de adsorción: 100 h.
4. Estudio en régimen dinámico de la adsorción de los herbicidas en las condiciones más favorables determinadas en régimen estático: 50 h
5. Análisis, interpretación y discusión de los resultados: 74 h
6. Preparación de la memoria y exposición del Trabajo Fin de Grado: 50 h
7. Tutorías: 6h



10. IMPLICACIONES ÉTICAS

El TFG requiere autorización de la Comisión de Ética: Sí No

En caso afirmativo, es preceptivo adjuntar la autorización del Comité de Bioética de la Universidad de Jaén o, en su defecto, la solicitud realizada a dicha Comisión.

Nota informativa: Para completar este Anexo II se recomienda consultar la guía docente de la asignatura del Trabajo Fin de Grado que está disponible en el siguiente enlace:

https://uvirtual.ujaen.es/pub/es/informacionacademica/catalogoguiasdocentes/p/2014-15/2/103A/10316001/es/2014-15-10316001_es.html

Más información: <http://www10.ujaen.es/conocenos/centros/facexp/trabajofingrado>