

**Anexo II**

**TITULACIÓN: Grado en Química**

**MEMORIA INICIAL DEL TRABAJO FIN DE GRADO**

**CENTRO: Facultad de Ciencias Experimentales**  
**CURSO ACADÉMICO: 2015-16**



UNIVERSIDAD DE JAÉN  
*Facultad de Ciencias Experimentales*

**Título del Trabajo Fin de Grado: Estudio de la complejación de flavonoides con metales de interés biológico aplicando técnicas de Modelización Molecular**

**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)**

Francisco Partal Ureña  
 Departamento de Química Física y Analítica  
 Área de Química Física  
 Despacho B3-112  
 Email: [fpartal@ujaen.es](mailto:fpartal@ujaen.es)  
 Tlfno: 953 21 25 55

Ana África Márquez García  
 Departamento de Química Física y Analítica  
 Área de Química Física  
 Despacho B3-103  
 Email: [amarquez@ujaen.es](mailto:amarquez@ujaen.es)  
 Tlfno: 953 21 33 60

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

**Experimental, 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:

- CE6. Aplicar los principios de la mecánica cuántica en la descripción de la estructura y propiedades de átomos y moléculas.
- CE15. Identificar la estructura y reactividad de las principales clases de biomoléculas y la química de los principales procesos biológicos.

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

### Resultados de aprendizaje

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

### 5. ANTECEDENTES

Los flavonoides son fitoquímicos (actualmente se conocen alrededor de 8000 compuestos individuales distintos, tanto flavonoides individuales como unidos a azúcares, principalmente) que actúan en las plantas como antioxidantes, antimicrobianos, fotorreceptores, etc.

Diferentes estudios sobre este tipo de compuestos pusieron de manifiesto que los flavonoides presentan actividad farmacológica y terapéutica, incluyendo actividad antialérgica, antiviral, antiinflamatoria, vasodilatadora y antitumoral. La mayoría de estos estudios se dedicaron a relacionar su actividad antioxidante con la presencia de un doble enlace C2-C3, un grupo OH en C3, grupos OH en el anillo B y la coplanaridad de los anillos AC-B. Esta actividad antioxidante se ha relacionado también con la habilidad de estos compuestos para secuestrar metales involucrados en procesos redox celulares que pueden dar lugar a procesos de estrés oxidativo.

Actualmente, sin embargo, se ha podido comprobar que algunos de ellos también pueden presentar actividad prooxidante y protumoral en ciertas condiciones.

Desde un punto de vista teórico, los estudios mayoritariamente se dedican al estudio de la relación estructura-actividad antioxidante y en menor medida al estudio termodinámico y cinético de los procesos involucrados en dicha actividad. La mayoría de los trabajos se llevan a cabo dentro de la Teoría del Funcional de la Densidad (DFT).

### 6. HIPÓTESIS DE TRABAJO

Con el presente Trabajo Fin de Grado se pretende introducir al alumno en la aplicación de las técnicas de Modelización Molecular y Química Computacional dentro del campo de la Química Biológica.

En él se llevará a cabo el estudio de las estructuras molecular y electrónica de un flavonoide específico.

Posteriormente se caracterizarán teóricamente la afinidad por metales de este flavonoide dependiendo del sitio de complejación. Para ello se usará el catión metálico  $Zn^{2+}$  como catión de prueba.

Posteriormente se estudiará el efecto que la complejación con el metal tiene sobre las estructuras molecular y electrónica de dicho flavonoide, así como su influencia sobre algunas propiedades químicas de interés bioológico y farmacológico.

Los cálculos teóricos se llevarán a cabo dentro de la aproximación de molécula aislada (fase gas), rotor rígido y oscilador armónico, aplicando la metodología Hartree-Fock (HF) y la Teoría del Funcional de la Densidad (DFT).

## 7. BREVE DESCRIPCIÓN DE LAS ACTIVIDADES A REALIZAR

1. Revisión bibliográfica dirigida para conocer los estudios previos sobre la estructura y las propiedades antioxidantes de los flavonoides seleccionados.
2. Introducción a los conceptos básicos de Modelización Molecular y Química Computacional que serán utilizados durante el desarrollo del presente Trabajo Fin de Grado.
3. Inicio en el manejo de programas específicos utilizados en Modelización Molecular y Química Computacional, desde visualizadores hasta programas de cálculo.
4. Estudio del paisaje conformacional de las moléculas seleccionadas y sus complejos metálicos; cálculo de las propiedades químicas de interés.
5. Análisis de los resultados obtenidos y conclusiones.
6. Elaboración de la memoria del Trabajo Fin de Grado y de una presentación para su exposición pública.

## 8. DOCUMENTACIÓN/BIBLIOGRAFÍA

- 1) Andersen ØM, Markham KR (eds), *Flavonoids: chemistry, biochemistry and applications*, Taylor and Francis (2006)
- 2) Carloni P, Alber F (eds), *Quantum Medicinal Chemistry, Vol 17* en “*Methods and Principles in Medicinal Chemistry*”, Wiley-VCH (2003)
- 3) Crichton RR, *Biological Inorganic Chemistry. An introduction*, Elsevier (2008).
- 4) Lewars EG, *Computational Chemistry. Introduction to the theory and applications of molecular and quantum mechanics 2<sup>nd</sup> Edition*, Springer (2011)
- 5) Bachrach SM, *Computational Organic Chemistry*, Wiley (2007)
- 6) Ramírez Avi MC, Márquez García AA, Partal Ureña F, *Theor. Chem. Acc.* 134 (2015) 52
- 7) Procházková D, Boušová I, Wilhelmová N, *Fitoterapia* 82 (2011) 513-523
- 8) Selvaraj S, Krishnaswamy S, Devashya V, Sethuraman S, Krishnan UM, *Med. Res. Rev.* 34 (4) (2014) 677–702

## 9. CRONOGRAMA PROVISIONAL

Semana	A5- Trabajo fin de Grado	Trabajo autónomo	Observaciones
Nº 1, Ene 25 – Ene 29, 2016	1h	24h	Actividad 1 Actividad 2
Nº 2, Feb 1 – 5, 2016		24h	
Nº 3, Feb 8 - 12, 2016		24h	
Nº 4, Feb 15 - 19, 2016	1,5h	24h	Actividad 2 Actividad 3 Actividad 4
Nº 5, Feb 22 – Feb 26, 2016		25h	
Nº 6, Feb 29 - Mar 4, 2016		25h	
Nº 7, Mar 7 - 11, 2016		25h	
Nº 8, Mar 14 - 18, 2016		24h	
<b>SEMANA SANTA MAR 21- 27</b>			
Nº 9, Mar 28 - Abr 1, 2016	1h	25h	Actividad 4 Actividad 5

Nº 10, Abr 4 - 8, 2016		25h	
Nº 11, Abr 11 - 15, 2016		25h	
Nº 12, Apr 18 - 22, 2016	1,5h	25h	Actividad 5 Actividad 6
Nº 13, Abr 25 - 29, 2015		25h	
Nº. 14, May 2 - 6, 2016		25h	Actividad 6
Nº. 15, May 9 - 13, 2016		25h	
Horas totales:		5h	370h

### 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](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>