

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 actividad antioxidante de flavonoides frente a especies reactivas de oxígeno (ROS) producidas en las células 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
Tlfno: 953 21 25 55

Ana África Márquez García
Departamento de Química Física y Analítica
Área de Química Física
Despacho B3-103
Email: am Marquez@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

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.

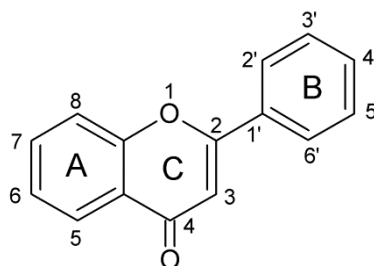
* Estas son las competencias mínimas. Añadir las competencias necesarias para cada Trabajo Fin de Grado propuesto

Resultados de aprendizaje

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 flavonas son un subgrupo dentro del grupo de los flavonoides (en la figura se representa la estructura y numeración de la molécula). 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. Se sabe actualmente, sin embargo, 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 derivados seleccionados de la molécula de flavona.

Posteriormente se caracterizarán teóricamente los productos intermedios y finales de las tres posibles vías en que los flavonoides pueden reaccionar con ROS celulares seleccionadas, y que son las reacciones de transferencia de hidrógeno (HAT), la Pérdida de Protón – Transferencia de Electrón Secuencial (SPLET) y la Transferencia de Electrón – Transferencia de Protón Simple (SET-PT).

Posteriormente se obtendrán los parámetros termodinámicos que caracterizan a

dichas reacciones y se propondrá una relación estructura-actividad antioxidante.

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 cálculo de las propiedades químicas de interés para determinar sus propiedades antioxidantes; estudio de la reactividad química.
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) Ramírez Avi MC, Márquez García AA, Partal Ureña F, *Theor. Chem. Acc.* 134 (2015) 52
- 3) Senthil kumar K, Kumaresan R, *Comp. Theor. Chem.* 985 (2012) 14-22
- 4) Trouillas P, Marsal P, Siri D, Lazzaroni R, Duroux JL, *Food Chem.* 97 (2006) 679-688
- 5) Rong YZ, Wang ZW, Zhao B, *Food Biophys.* 8 (2013) 90-94
- 6) Procházková D, Boušová I, Wilhelmová N, *Fitoterapia* 82 (2011) 513-523
- 7) Halliwell B, Gutteridge JMC, *Free radicals in Biology and Medicine 4th Edition*, Oxford University Press (2007)
- 8) Lewars EG, *Computational Chemistry. Introduction to the theory and applications of molecular and quantum mechanics 2nd Edition*, Springer (2011)
- 9) Bachrach SM, *Computational Organic Chemistry*, Wiley (2007)

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	
SEMANA SANTA MAR 21- 27			
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	375h

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>