

**Anexo II**

**TITULACIÓN: Grado en Química**

**MEMORIA INICIAL DEL TRABAJO FIN DE GRADO**

**CENTRO: Facultad de Ciencias Experimentales**



UNIVERSIDAD DE JAÉN  
*Facultad de Ciencias Experimentales*

**Título del Trabajo Fin de Grado: Determinación espectroscópica de la constante del equilibrio de dimerización del ácido (+)-S-cetopínico en disolventes de distinta polaridad**

**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)**

**NOMBRE:** LÓPEZ GONZALEZ, JUAN JESÚS

**DEPARTAMENTO:** 627 - QUÍMICA FÍSICA Y ANALÍTICA

**ÁREA:** 755 - QUÍMICA FÍSICA

**N. DESPACHO:** B3 - 123 **E-MAIL:** [jjlopez@ujaen.es](mailto:jjlopez@ujaen.es) **TLF:** 951212754

**URL WEB:** -

**NOMBRE:** MONTEJO GÁMEZ, MANUEL

**DEPARTAMENTO:** 627 - QUÍMICA FÍSICA Y ANALÍTICA

**ÁREA:** 755 - QUÍMICA FÍSICA

**N. DESPACHO:** B3 - 114 **E-MAIL:** [mmontejo@ujaen.es](mailto:mmontejo@ujaen.es) **TLF:** 951213649

**URL WEB:** [www4.ujaen.es/~mmontejo](http://www4.ujaen.es/~mmontejo)

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

**Tipo:** Específico

**Variante:** 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:

- C10 - Comprender los aspectos estructurales de los elementos químicos y sus compuestos, incluyendo estereoquímica.
- C16 - Relacionar el fundamento de las técnicas instrumentales y sus aplicaciones.

#### 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

Es bien conocida la ubicuidad de los enlaces de hidrógeno en sistemas moleculares y supramoleculares de muy diversa índole, así como el hecho de que su incidencia condiciona tanto la estructura como, por ende, las propiedades químico-físicas de las especies que los presentan. Esto justifica el notable esfuerzo que históricamente se ha venido realizando en el desarrollo de métodos y técnicas que permitan la detección y caracterización de este tipo de interacciones, tanto desde el punto de vista teórico (cálculos químico-cuánticos) como experimental, destacando en este caso las técnicas cristalográficas (en el caso de especies en estado sólido) y espectroscópicas.

Por su parte, los ácidos carboxílicos constituyen una familia de compuestos cuya organización en fase sólida está principalmente condicionada por el establecimiento de enlaces de hidrógeno entre unidades monoméricas vecinas. Más allá, es conocido que, en algunas de estas especies, la tendencia a la formación de oligómeros por enlaces de hidrógeno persiste incluso en disolución, dándose que, dependiendo de la concentración y el disolvente, estos oligómeros pueden coexistir con las especies monoméricas.

## 6. HIPÓTESIS DE TRABAJO

En el caso concreto de la especie a estudiar, el ácido (+)-S-cetopínico, la presencia concomitante de monómeros y dímeros por enlaces de hidrógeno en una disolución de concentración determinada puede detectarse, de forma relativamente simple, mediante el registro del espectro FTIR en disolución, que permitirá la observación de determinadas bandas vibracionales (principalmente aquellas relacionadas con los grupos carbonilo) indicativas de su presencia conjunta. De hecho, el análisis detallado de la intensidad de dichas señales y su evolución al variar la concentración, puede permitir la determinación experimental de la constante de equilibrio de formación de los dímeros que, en última instancia, permitirá también determinar la fracción de monómeros y dímeros presentes en la muestra.

De este modo, se plantea como objetivo del proyecto la determinación experimental de la constante del equilibrio de dimerización del ácido (+)-S-cetopínico en dos disolventes de distinta polaridad (cloroformo y acetonitrilo deuterados) mediante el estudio detallado de la evolución del espectro vibracional de esta especie en disoluciones de distinta concentración.

## 7. BREVE DESCRIPCIÓN DE LAS ACTIVIDADES A REALIZAR

1. Revisión bibliográfica sobre antecedentes del trabajo a desarrollar
2. Desarrollo de la parte experimental del trabajo, incluyendo: tratamiento y preparación de muestras, manejo de equipo FTIR y software relacionado, registro y manipulación de espectros (deconvolución de bandas, integración de intensidades, etc...), así como el correspondiente manejo de los datos obtenidos.
3. Presentación y discusión de resultados obtenidos y de las conclusiones alcanzadas.

## 8. DOCUMENTACIÓN/BIBLIOGRAFÍA

- [1] J. S. Chen, C. C. Wu and D. Y. Kao, Spectrochim. Acta A, 2004, 60, 2287-2293.  
[2] T. Buffeteau, D. Cavagnat, A. Bouchet and T. Brotin, J. Phys. Chem. A, 2007, 111, 1045-1051  
[3] T. Kuppens, W. Herrebout, B. van der Veken and P. Bultinck, J. Phys. Chem. A 2006, 110, 10191-10200.  
[4] M. Diem, "Introduction to Modern Vibrational Spectroscopy", Wiley Interscience, New York, 1993.  
[5] E. Arunan y cols., Defining the Hydrogen Bond: An Account", 2011, 83, 1619.  
[6] E. Arunan y cols., "Definition of the Hydrogen Bond", Pure Appl. Chem., 2011, 83, 1637.  
[7] G.A. Jeffrey, "A Introduction to Hydrogen Bonding (Topics in Physical Chemistry), Oxford University Press, New York, 1997.

## 9. CRONOGRAMA PROVISIONAL

**Semanas 1-4. Revisión bibliográfica.**

**Semanas 3-12. Desarrollo de la parte experimental: preparación de muestras, registro y manipulación de espectros vibracionales y manejo de datos.**

**Semanas 12-16. Elaboración de la memoria y preparación de 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/catalogoguiasdocentes/p/2014-15/2/103A/10316001/es/2014-15-10316001\\_es.html](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>