



UNIVERSIDAD DE JAÉN

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:

Síntesis de bolaanfífilos de núcleo central aromático para interactuar con sistemas grafénicos.

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 Melguizo Guijarro

DEPARTAMENTO: U128-QUÍMICA INORGÁNICA Y ORGÁNICA

ÁREA: QUÍMICA INORGÁNICA

DESPACHO: B3-451

E-MAIL: mmelgui@ujaen.es

TLF: 953 212742

M^a Celeste García Gallarín

DEPARTAMENTO: U128-QUÍMICA INORGÁNICA Y ORGÁNICA

ÁREA: QUÍMICA ORGÁNICA

DESPACHO: B3-452

E-MAIL: cgarcia@ujaen.es

TLF: 953 212186

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

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.



UNIVERSIDAD DE JAÉN

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 preparación de láminas de grafeno de tamaño micrométrico con elevado grado de integridad estructural es un proceso de gran interés por la demanda que existe sobre este tipo de materiales para la investigación de nuevas aplicaciones en campos como la microelectrónica, los sensores moleculares, los sistemas de captación y almacenamiento de energía, los sistemas electrocatalíticos o los materiales compuestos [1].

Entre las diversas vías de preparación de grafeno que se han explorado se encuentra el tratamiento de cristales de grafito puro con detergentes en medio acuoso, que permiten la separación de láminas individuales y placas con muy pocas láminas grafénicas apiladas, y su mantenimiento en suspensiones acuosas estables. Por esta vía se han conseguido suspensiones de hasta 1 mg/ml de grafeno [2], lo que se considera una concentración importante desde el punto de vista operativo. Las fuerzas que hay que vencer para conseguir la dispersión de láminas independientes de grafeno a partir de cristales de grafito son las intensas interacciones π - π que se establecen entre láminas contiguas.

En el caso de los *compuestos de intercalación de grafito* [CIG, constituidos por láminas de grafeno entre las que se intercalan especies químicas de diversa naturaleza, que pueden ser neutras o portadoras de carga, esto es, cationes y aniones inorgánicos u orgánicos] las interacciones entre láminas adyacentes de grafeno se ven sustituidas por otro tipo de interacciones que se establecen entre las láminas y las especies químicas que se intercalan entre ellas. Esto puede representar una oportunidad para vencer las fuerzas cohesivas de los cristales de grafeno y facilitar la separación de sus láminas constituyentes. De hecho, recientemente se han aprovechado la estrategia de formación de CIGs como intermedios para generar láminas de grafeno o apilamientos de muy pocas capas dispersables en disolventes [3], si bien el mantenimiento de las láminas separadas en suspensión requiere el tratamiento con detergentes.

En el Departamento de Química Inorgánica y Orgánica de la UJA mantenemos una línea de preparación de materiales de base grafénica (carbones activados funcionalizados y nanotubos de carbono) funcionalizados con receptores que tienen dos fragmentos estructurales diferenciados: a) un sistema aromático o heteroaromático, cuya misión es establecer fuertes enlaces no-covalentes, de tipo π - π , con las superficies grafénicas; b) un brazo hidrofílico con propiedades básicas capaces de interactuar con especies ácidas de Lewis en disolución acuosa. En el caso de que al núcleo central aromático de estos receptores, encargado de establecer el enlace con las superficies grafénicas, se una a dos restos hidrofílicos, las moléculas resultantes serán detergentes del tipo "bolaanfílicos" (moléculas con perfil alargado que tienen un centro lipofílico y ambos extremos hidrofílicos). Tratando materiales de base grafénica con este tipo de receptores conseguimos que su superficie quede recubierta de funciones hidrofílicas, sin alterar la red hexagonal bidimensional de enlaces covalentes propia de las superficies grafénicas.[4]

En este Trabajo de Fin de Grado en Química pretendemos sintetizar moléculas con perfil de bolaanfílicos con los extremos hidrofílicos basados en sales de amonio cuaternarias



UNIVERSIDAD DE JAÉN

(ver figura).

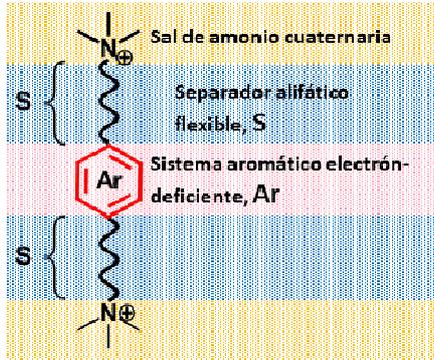


Figura 1. Esquema de la estructura de los bolaanfífilos que se desea sintetizar.

Esto supone un cambio significativo con respecto a otras moléculas que hemos sintetizado previamente, puesto que los grupos hidrofílicos no tienen ahora carácter básico.

Sin embargo, la carga permanente que presentan las sales de amonio cuaternarias las hace adecuadas para participar en procesos de intercambio iónico con iones Na^+ intercalados entre láminas gráficas, de acuerdo con los métodos de intercambio que se han publicado recientemente en la literatura [5-7]. De esta manera, tras alojarse entre láminas gráficas, estos compuestos serían capaces de adherirse mediante enlaces no-covalentes, de tipo π - π , a las superficies gráficas y funcionalizarlas con grupos amonio cuaternario que permitirían dispersar láminas individuales de grafeno en medios hidrofílicos (Figura 2).

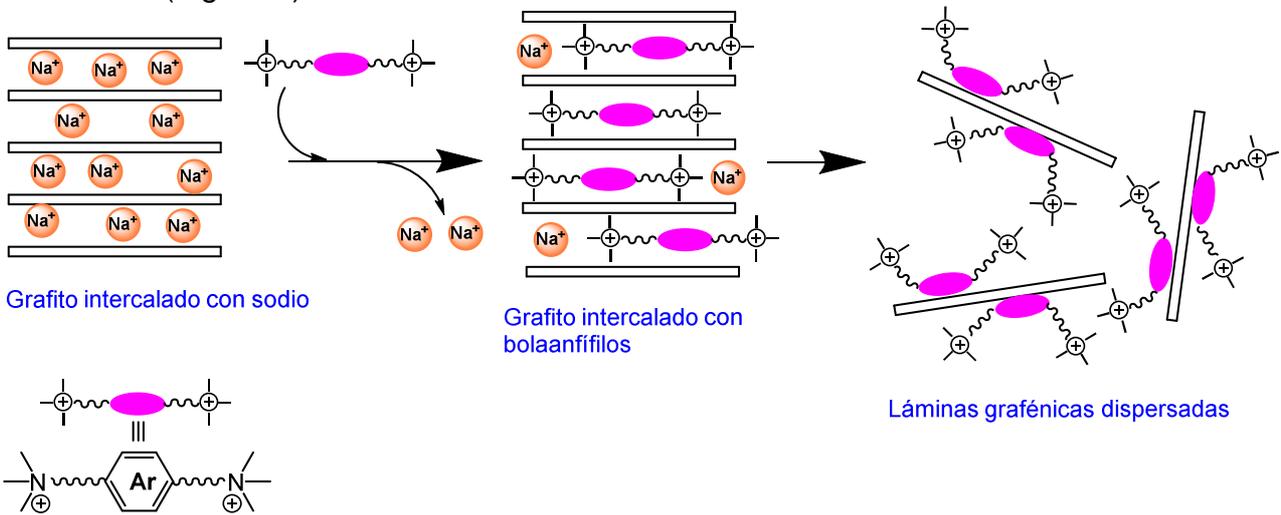


Figura 2. Interés de los bolaanfífilos como potenciales intercalantes de grafito y dispersantes de láminas gráficas.

6. HIPÓTESIS DE TRABAJO

1.- Es posible sintetizar bolaanfífilos basados en núcleos centrales aromáticos deficientes electrónicamente y brazos laterales con funciones amonio cuaternaria.



UNIVERSIDAD DE JAÉN

7. BREVE DESCRIPCIÓN DE LAS ACTIVIDADES A REALIZAR

1. Revisión de literatura relacionada con el tema.
2. Preparación de precursores sintéticos.
3. Preparación de bolaanfífilos.
4. Caracterización estructural de los bolaanfífilos.
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] Ferrari AC, Bonaccorso F, Fal'ko V, Novoselov KS, Roche S, Boggild P et al. Science and technology roadmap for graphene, related two-dimensional crystals, and hybrid systems. *Nanoscale* 2015;7:4598-810.

[2] Guardia L, Fernández-Merino MJ, Paredes JI, Solís-Fernández P, Villar-Rodil S, Martínez-Alonso A et al. High-throughput production of pristine graphene in an aqueous dispersion assisted by non-ionic surfactants. *Carbon* 2011;49:1653-62.

[3] Niu L, Li M, Tao X, Xie Z, Zhou X, Raju APA et al. Salt-assisted direct exfoliation of graphite into high-quality, large-size, few-layer graphene sheets. *Nanoscale* 2013;5:7202-8.

[4] Lopez-Garzon R, Godino-Salido ML, Gutierrez-Valero MD, Arranz-Mascaros P, Melguizo M, Garcia 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.

[5] Maluangnont T, Lerner MM, Gotoh K. Synthesis of Ternary and Quaternary Graphite Intercalation Compounds Containing Alkali Metal Cations and Diamines. *Inorg Chem* 2011;50:11676-82.

[6] Sirisaksoontorn W, Adenuga AA, Remcho VT, Lerner MM. Preparation and Characterization of a Tetrabutylammonium Graphite Intercalation Compound. *J Am Chem Soc* 2011;133:12436-8.

[7] Sirisaksoontorn W, Lerner MM. Preparation of a Homologous Series of Tetraalkylammonium Graphite Intercalation Compounds. *Inorg Chem* 2013;52:7139-44.

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



UNIVERSIDAD DE JAÉN

- 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>