

**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 y caracterización de receptores iónicos derivados de 3,6-s-difeniltetrazina y bis[2-(morfolin-1-il)etil]amina**

**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<sup>a</sup> Dolores López de la Torre.

DEPARTAMENTO: U128 - QUÍMICA INORGÁNICA Y ORGÁNICA

ÁREA: QUÍMICA ORGÁNICA

N. DESPACHO: B3 – 464

E-MAIL: [mdlopez@ujaen.es](mailto:mdlopez@ujaen.es)

TLF: 953212748

M<sup>a</sup> Luz Godino Salido

DEPARTAMENTO: U128 - QUÍMICA INORGÁNICA Y ORGÁNICA

ÁREA: QUÍMICA ORGÁNICA

N. DESPACHO: B3 – 460

E-MAIL: [mlgodino@ujaen.es](mailto:mlgodino@ujaen.es)

TLF: 953212745

**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.

<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

Las asombrosas propiedades que los estudios científicos de las dos últimas décadas han verificado para los materiales carbonosos de base grafénica (tales como nanotubos de carbono o láminas de grafeno) los convierten en productos de partida fundamentales para la preparación de componentes y elementos constructivos de nuevos materiales dirigidos a aplicaciones tecnológicas avanzadas en los principales campos con relevancia social y económica. Así, las aplicaciones en biomedicina (Sharei *et al.*, 2013; Skoda *et al.*, 2014), en captación de energía de fuentes renovables y el almacenamiento de la misma (Bonaccorso *et al.*, 2015; Guldi *et al.*, 2005; Kouhnavard *et al.*, 2015; Salunkhe *et al.*, 2014), la construcción de dispositivos electrónicos y optoelectrónicos más ligeros y respetuosos con el ambiente (Kordás *et al.*, 2007; Valentini 2015), la fabricación de nuevos materiales de altas prestaciones (Hu *et al.*, 2010; Naraghi *et al.*, 2010; Zhang *et al.*, 2015), la fabricación de sensores ultra pequeños y de bajo consumo (Ding & Star, 2012; Kwon *et al.*, 2014; Matzeu *et al.*, 2015), o la preparación de nuevos catalizadores más eficientes o aplicables sobre nuevos procesos (Frank *et al.*, 2011; Soo *et al.*, 2015) son algunos de los campos en los que se prevé un fuerte impacto de estos materiales de base grafénica y en los que, consecuentemente, se desarrolla una intensa actividad investigadora.

Todas estas potenciales aplicaciones, dependientes de las propiedades fuera de lo común que presentan los materiales de base grafénica, tienen su base en la peculiar estructura química de las láminas que los constituyen. Por este motivo, la manipulación e integración de los materiales grafénicos en sistemas funcionales más complejos supone un reto científico y tecnológico, para poder ser manipulados y adaptados a entornos específicos. Las propiedades de estos materiales deben ser modificadas, pero esa modificación debe respetar al máximo la estructura química de las láminas grafénicas,

La funcionalización no-covalente de superficies grafénicas (incluyendo grafeno, nanotubos de carbono o superficies de materiales de grafito) a través de interacciones  $\pi$ - $\pi$  con moléculas aromáticas convenientemente funcionalizadas presenta la ventaja, frente a funcionalización mediante enlaces covalentes, de que mantiene inalterada la conjugación en la red de enlaces de dichas superficies, responsable principal de sus notables propiedades fisico-química.

La funcionalización no-covalente puede llevarse a cabo de tres diferentes maneras: a) la envoltura de polímeros; b) adsorción de surfactantes; c) con pequeñas moléculas aromáticas (Karousis *et al.*, 2010).

Nos centramos en la funcionalización no covalente con pequeñas moléculas aromáticas, que consiste en la adsorción de estas pequeñas moléculas sobre los CNT por interacciones  $\pi$ - $\pi$ , que normalmente

se realiza con moléculas bifuncionales formadas por una parte aromática (la unidad de anclaje) y otra parte (la unidad funcional) que posee algunas propiedades fisicoquímicas de interés, ambas mitades suelen estar conectadas mediante una cadena flexible de polimetileno. La mitad de anclaje es la responsable de la fijación de la molécula a la superficie grafénica mediante interacciones  $\pi$ - $\pi$ , mientras que la parte funcional proporcionará sus propiedades fisicoquímicas a dicha superficie.

Las moléculas aromáticas  $\pi$ -deficientes son particularmente apropiadas para enlazarse a las superficies de tipo grafénico mediante interacciones no covalentes de tipo  $\pi$ - $\pi$  (el conocido como  $\pi$ -stacking). Un ejemplo de sistema aromático  $\pi$ -deficiente es el de 1,2,4,5-tetrazina (s-tetrazina). Nosotros pensamos que es un candidato perfecto para dar  $\pi$ -stacking con superficies grafénicas dada la elevada deficiencia  $\pi$ -electrónica de su núcleo aromático, producto de la presencia de cuatro átomos de nitrógeno en su estructura.

En el Departamento de Química Inorgánica y Orgánica de la UJA mantenemos una línea de preparación de materiales de base grafénica y nuestro trabajo se enmarca precisamente dentro de este campo de la funcionalización no-covalente mediante interacciones  $\pi$ - $\pi$  de superficies grafénicas, que consideramos de interés dentro de las líneas de investigación del grupo en el que se desarrollará este TFG.

Un estudio teórico reciente sobre la interacción  $\pi$   $\pi$  entre benceno y un anillo heteroaromáticos (Huber, Margreiter et al. 2014) ha demostrado que la interacción mixta  $\pi$   $\pi$  entre benceno y azinas es más favorable que la interacción homo  $\pi$   $\pi$  entre dos unidades de benceno y se convierte en más fuerte a medida que el número de átomos de nitrógeno en el anillo de azina se hace mayor (e.g. *s*-triazina > pirimidina  $\approx$  pirazina  $\approx$  piridazina > piridina). Y sin embargo hay muy pocos trabajos que hagan referencia a tetrazinas.

En un trabajo anterior llevado a cabo en el grupo de investigación (D. López Puertollano, 2014) se ha comprobado que los derivados de 3,6-difenil-*s*-tetrazina poseen una importante capacidad para unirse a la superficie de nanotubos de carbono multipared (MWCNT) a través de enlaces no-covalentes que tienen su base en las interacciones  $\pi$ - $\pi$  entre el sistema aromático fuertemente  $\pi$ -deficiente de los derivados de *s*-tetrazina y el sistema  $\pi$  extendido de la superficie grafénica de los MWCNT y sin embargo, la mayoría de estos derivados resultaron ser insolubles en muchos disolventes, incluyendo el agua, disolvente en el que se pretendíamos realizar los ensayos de adsorción sobre la superficie de MWCNT. Aunque, uno de ellos resultó ser muy soluble en agua, permitiendo realizar ensayos de adsorción sobre los nanotubos de carbono, nos ha animado preparar nuevos derivados de *s*-tetrazina más solubles que nos permitan sintetizar y estudiar las propiedades de los nuevos materiales que contienen unidades de *s*-tetrazina unidas no-covalentemente a nanotubos.

## 6. HIPÓTESIS DE TRABAJO

El objetivo de este trabajo de fin de grado consiste en la síntesis de un derivado de *s*-tetrazina que

presente solubilidad suficiente en medio acuoso como para poder realizar un estudio funcional de los mismos como agentes complejantes.

## 7. BREVE DESCRIPCIÓN DE LAS ACTIVIDADES A REALIZAR

1.- Revisión bibliográfica del tema.

2.- Síntesis y determinación estructural de un derivado de s-tetrazina. Que se llevará a cabo mediante los procedimientos espectroscópicos habituales (RMN, IR, UV-Vis, MS, ...) para la caracterización de compuestos orgánicos.

3.- Estudio funcional como agentes complejantes de iones metálicos del receptor; este se realizará a través de la valoración potenciométrica de disoluciones acuosas de estos compuestos, para determinar así sus propiedades ácido-base.

3.- Preparación de memoria del TFG.

4.- Defensa pública del TFG.

## 8. DOCUMENTACIÓN/BIBLIOGRAFÍA

- Bonaccorso, F., Colombo, L., Yu, G., Stoller, M., Tozzini, V., Ferrari, A. C., Pellegrini, V. (2015). Graphene, related two-dimensional crystals, and hybrid systems for energy conversion and storage. *Science (Washington, DC, United States)*, 347(6217), 41. doi:10.1126/science.1246501
- Ding, M., & Star, A. (2012). Selecting fruits with carbon nanotube sensors. *Angewandte Chemie, International Edition*, 51(31), 7637-7638. doi:10.1002/anie.201203387
- Frank, B., Blume, R., Rinaldi, A., Trunschke, A., & Schlögl, R. (2011). Oxygen insertion catalysis by sp<sup>2</sup> carbon. *Angewandte Chemie International Edition*, 50(43), 10226-10230. doi:10.1002/anie.201103340
- Guldi, D. M., Rahman, G. M. A., Prato, M., Jux, N., Qin, S., & Ford, W. (2005). Single-wall carbon nanotubes as integrative building blocks for solar-energy conversion. *Angewandte Chemie*, 117(13), 2051-2054. doi:10.1002/ange.200462416
- Hu, L., Pasta, M., Mantia, F. L., Cui, L., Jeong, S., Deshazer, H. D., Cui, Y. (2010). Stretchable, porous, and conductive energy textiles. *Nano Letters*, 10(2), 708-714. doi:10.1021/nl903949m
- HUBER, R.G., MARGREITER, M.A., FUCHS, J.E., VON GRAFENSTEIN, S., TAUTERMANN, C.S., LIEDL, K.R. and FOX, T., 2014. Heteroaromatic  $\pi$ -Stacking Energy Landscapes. *Journal of Chemical Information and Modeling*, 54(5), pp. 1371-1379.
- Karousis, N., Tagmatarchis, N., & Tasis, D. (2010). Current progress on the chemical modification of carbon nanotubes. *Chemical Reviews (Washington, DC, United States)*, 110(9), 5366-5397. doi:10.1021/cr100018g
- Kordás, K., Tóth, G., Moilanen, P., Kumpumäki, M., Vähäkangas, J., Uusimäki, A., Ajayan, P. M. (2007).



- Chip cooling with integrated carbon nanotube microfin architectures. *Applied Physics Letters*, 90(12), 123105. doi:<http://dx.doi.org/10.1063/1.2714281>
- Kouhnavard, M., Ludin, N. A., Ghaffari, B. V., Sopian, K., & Ikeda, S. (2015). Carbonaceous materials and their advances as a counter electrode in dye-sensitized solar cells: Challenges and prospects. *Chemosuschem*, 8(9), 1510-1533. doi:10.1002/cssc.201500004
- Kwon, O. S., Hur, J., Koh, D., & Bae, J. (2014). High performance sensors using graphene based organic-inorganic hybrids. *Current Organic Chemistry*, 18(18), 2415-2429. doi:10.2174/1385272819666140806202947
- López Puertollano, D. (2014). Synthesis, structure characterization and adsorption on carbon nanotubes of 3,6-diphenyl-1,2,4,5-tetrazine derivatives. *Trabajo Fin de Grado. Facultad de Ciencias Experimentales, Universidad de Jaén*.
- Matzeu, G., Florea, L., & Diamond, D. (2015). Advances in wearable chemical sensor design for monitoring biological fluids. *Sensors and Actuators, B: Chemical*, 211, 403-418. doi:10.1016/j.snb.2015.01.077
- Naraghi, M., Filleter, T., Moravsky, A., Locascio, M., Loutfy, R. O., & Espinosa, H. D. (2010). A multiscale study of high performance double-walled Nanotube-Polymer fibers. *ACS Nano*, 4(11), 6463-6476. doi:10.1021/nn101404u
- Salunkhe, R. R., Lee, Y., Chang, K., Li, J., Simon, P., Tang, J., Yamauchi, Y. (2014). Nanoarchitected graphene-based supercapacitors for next-generation energy-storage applications. *Chemistry - A European Journal*, 20(43), 13838-13852. doi:10.1002/chem.201403649
- Sharei, A., Zoldan, J., Adamo, A., Sim, W. Y., Cho, N., Jackson, E., Jensen, K. F. (2013). A vector-free microfluidic platform for intracellular delivery. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 110(6), 2082-2087. doi:10.1073/pnas.1218705110
- Skoda, M., Dudek, I., Jarosz, A., & Szukiewicz, D. (2014). Graphene: One material, many possibilities-application difficulties in biological systems. *Journal of Nanomaterials*, 890246/1-890246/11, 12 pp. doi:10.1155/2014/890246
- Soo, L. T., Loh, K. S., Mohamad, A. B., Daud, W. R. W., & Wong, W. Y. (2015). An overview of the electrochemical performance of modified graphene used as an electrocatalyst and as a catalyst support in fuel cells. *Applied Catalysis, A: General*, 497, 198-210. doi:10.1016/j.apcata.2015.03.008
- Valentini, L. (2015). Bio-inspired materials and graphene for electronic applications. *Materials Letters*, 148, 204-207. doi:10.1016/j.matlet.2015.02.072
- Zhang, J., Song, L., Zhang, Z., Chen, N., & Qu, L. (2014). Environmentally responsive graphene systems. *Small*, 10(11), 2151-2164. doi:10.1002/smll.201303080



## 9. CRONOGRAMA PROVISIONAL

Semanas 1-5: Revisión bibliográfica y selección de artículos

Semanas 6-8: Análisis y discusión de la información recopilada

Semanas 9-12: Realización de la memoria escrita

Semanas 13-15: Realización de la presentación audiovisual

## 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/facep/trabajofingrado>