



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 y caracterización de receptores iónicos derivados de 5-nitrosopirimidinas 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)

Manuel Melguizo Guijarro

DEPARTAMENTO: U128-QUÍMICA INORGÁNICA Y ORGÁNICA

ÁREA: QUÍMICA INORGÁNICA

DESPACHO: B3-451

E-MAIL: mmelgui@ujaen.es

TLF: 953 212742

M<sup>a</sup> Dolores Gutiérrez Valero

DEPARTAMENTO: U128-QUÍMICA INORGÁNICA Y ORGÁNICA

ÁREA: QUÍMICA INORGÁNICA

DESPACHO: B3-450

E-MAIL: mdgutie@ujaen.es

TLF: 953 212739

#### 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.

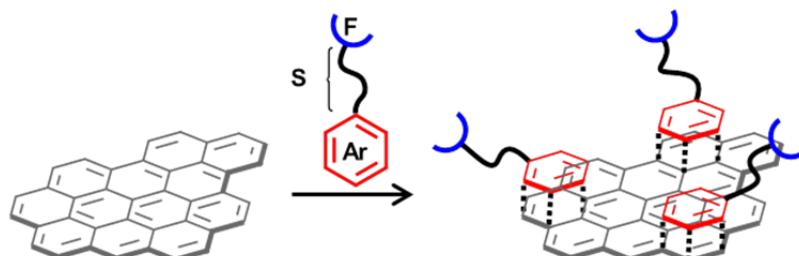


<b>Resultado 311003F</b>	Destreza en la elaboración de informes científicos complejos, bien estructurados y bien redactados.
<b>Resultado 311003G</b>	Destreza en la presentación oral de un trabajo, utilizando los medios audiovisuales más habituales.

## 5. ANTECEDENTES

La funcionalización no covalente [1] de sólidos carbonosos empleando derivados de 2-amino-5-nitrosopirimidina sustituidos en C(4) con funciones capaces de complejar iones metálicos y/o aniones es una metodología de funcionalización selectiva de la superficie de sólidos carbonosos en la que el grupo de investigación, donde se llevará a cabo el presente trabajo, tiene probada experiencia [2].

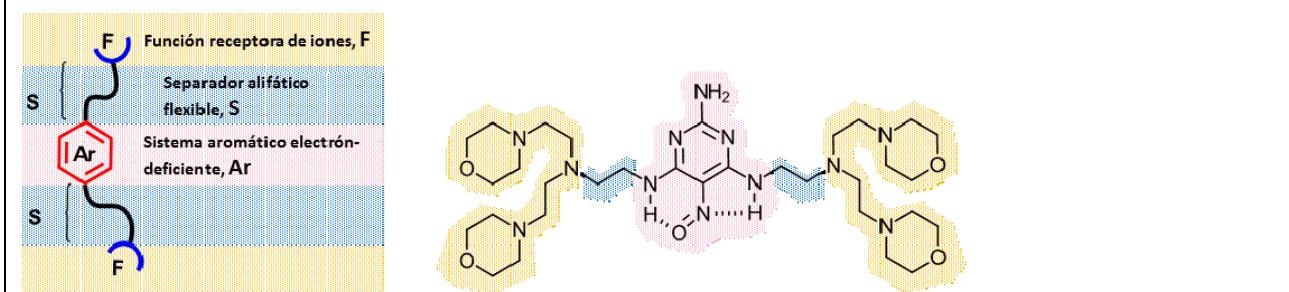
Esta metodología comienza por la preparación de los receptores que serán anclados a la superficie del carbón; éstos cuentan con dos zonas funcionales segregadas: una es la unidad de anclaje a la superficie del carbón (Ar), y la otra, una función receptora de iones que quedará pendiendo de la superficie del sólido carbonoso y que mantiene las propiedades complejantes que tenía en disolución acuosa antes de ser anclada a la superficie del carbón (F). Estas dos unidades funcionales se encuentran conectadas covalentemente a través de un separador (S) [3]



**Esquema.** Representación de la interacción receptor-superficie grafítica [2].

## 6. HIPÓTESIS DE TRABAJO

Hasta ahora los receptores sintetizados contienen una única función receptora de iones, F, unida a la función de anclaje, Ar,[2]. Es nuestra intención en este trabajo, preparar nuevos receptores con dos funciones receptoras por cada función de anclaje, con el doble objetivo de: aumentar la densidad de funciones receptoras disponibles para una misma extensión de superficie grafénica y facilitar el trabajo cooperativo de dos funciones en la complejación de especies químicas voluminosas con múltiples puntos de interacción. Con este objetivo, hemos pensado en la síntesis de un compuesto con un núcleo central heteroaromático derivado de 2-amino-5-nitrosopirimidina (que actuaría como unidad de anclaje no-covalente a las superficies grafénicas mediante interacciones  $\pi-\pi$ ), al que se unen, en el trabajo que planteamos, dos cadenas de las que penden dos unidades funcionales de bis[2-(morfolin-1-il)ethyl]amina, como se refleja en la figura siguiente

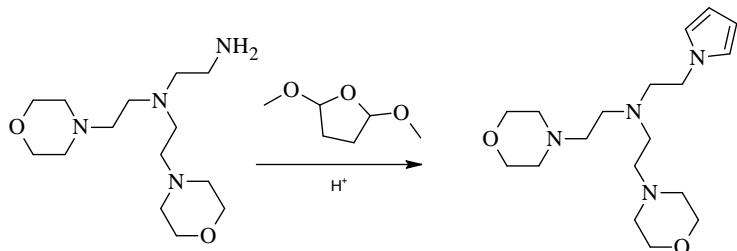




Partiendo de 2-amino-4,6-dimetoxipirimidina y tris(2-aminoetil)amina (TREN), ambos reactivos comerciales, se llevará a cabo la síntesis del receptor esquematizado haciendo uso de distintas etapas sintéticas descritas en literatura [4], [5], [6], [7]. Paralelamente se realizará la caracterización estructural de los distintos intermedios sintéticos aislados.

Para el estudio del carácter ácido-base se utilizarán los datos de valoraciones potenciométricas en disolución de esta molécula, que se procesarán mediante el Software Hyperquad [8]. Este estudio es de gran importancia dado que proporciona información sobre la especiación en disolución que es clave para programar las condiciones de los estudios de adsorción de receptores sobre materiales de carbón, que se realicen posteriormente y para la interpretación de los resultados que se obtengan en estos estudios. La naturaleza de las diferentes especies protonadas se establecerá mediante valoraciones de RMN ( $^{13}\text{C}$  y de  $^1\text{H}$ ) de disoluciones de los receptores en  $\text{D}_2\text{O}$  empleando valorantes deuterados ( $\text{NaOD}$  y  $\text{DCI}$ ).

A la hora de estudiar las características ácido-base de este compuesto, habrá que distinguir entre las que se atribuyen al núcleo de 2,4,6-triaminopirimidina y las que son propias de los brazos laterales de TREN. Para este propósito, resultaría muy conveniente disponer de compuestos modelo que nos sirvan para estudiar exclusivamente las características ácido-base de las estructuras de los brazos laterales. Este compuesto podría ser el de la figura, cuya síntesis es inmediata a partir de compuestos conocidos [7] y 2,5-dimetoxitetrahidrofuran:



## 7. BREVE DESCRIPCIÓN DE LAS ACTIVIDADES A REALIZAR

- Búsqueda bibliográfica de antecedentes
- Elaboración de un informe de antecedentes
- Caracterización de los productos de partida.
- Síntesis y caracterización estructural espectroscópica de los intermedios y productos finales.
- Estudio de la capacidad ácido-base y localización en la molécula de los centros activos como receptores de los productos finales
- Elaboración de la memoria de trabajo de fin de grado.
- Defensa pública de dicho trabajo.

## 8. DOCUMENTACIÓN/BIBLIOGRAFÍA

- 1) María Ángeles Herranz, Nazario Martín; “Noncovalent Functionalization of Carbon Nanotubes” en *Carbon Nanotubes and Related Structures: Synthesis,*



UNIVERSIDAD DE JAÉN

*Characterization, Functionalization, and Applications.* Dirk M. Guldi y Nazario Martín, eds. Wiley-VCH Verlag GmbH & Co, Weinheim, 2010. Págs. 103-134.

- 2) Rafael López-Garzón, M. Luz Godino-Salido, María D. Gutiérrez-Valero, Paloma Arranz-Mascarós, Manuel Melguizo, Celeste García, María Domingo-García, F. Javier López-Garzón; *Inorganica Chimica Acta* 2014, 417, 208–221.
- 3) Javier García-Martín, Rafaél López-Garzón, M. Luz Godino-Salido, M. Dolores Gutiérrez-Valero, Paloma Arranz-Mascarós, Rafael Cuesta-Martos, Francisco Carrasco-Marín; *Langmuir* 2005, 21 (12), 6908-6914.
- 4) Antonio Marchal, Manuel Nogueras, Adolfo Sánchez, John N. Low, Lieve Naesens, Erik De Clercq, y Manuel Melguizo; *Eur. J. Org. Chem.* 2010, 3823–3830.
- 5) Anne-Marie Albrecht-Gary, Sylvie Blanc, Frederic Biaso, Fabrice Thomas, Paul Baret, Gisele Gellon, Jean-Louis Pierre and Guy Serratrice; *Eur. J. Inorg. Chem.* 2003, 2596-2605.
- 6) Sunay V. Chankeshwara y Asit K. Chakraborti; *Organic Letters* 2006, 8 (15), 3259-3262.
- 7) Rubén Cruz Sánchez. *Preparación de derivados de perilenodiimida para comparar su capacidad de adhesión a nanotubos de carbono con la de derivados de 3,6-difeniltetrazina.* Trabajo de Fin de Grado. Facultad de Ciencias Experimentales, Universidad de Jaén. 2015.
- 8) Gans P, Sabatini A, Vacca A. *Talanta* 1996, 43, 1739.



UNIVERSIDAD DE JAÉN

## 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
  - 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](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>



UNIVERSIDAD DE JAÉN

## 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>