



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:

Moléculas liberadoras de monóxido de carbono: Preparación y estructura de tricarbonilmetalocompuestos.

1. DATOS BÁSICOS DE LA ASIGNATURA

NOMBRE: Trabajo fin de grado

CÓDIGO: 10316001

CARÁCTER: Obligatorio

Créditos ECTS: 15

CURSO:Cuarto

CUATRIMESTRE: Primero

2. TUTOR/COTUTOR(en su caso)

Sonia B. Jiménez Pulido

DEPARTAMENTO: U128 - QUÍMICA INORGÁNICA Y ORGÁNICA

ÁREA: QUÍMICA ORGÁNICA

N. DESPACHO: B3 – 466

E-MAIL: sjimenez@ujaen.es

TLF: 953212150

Miguel N. Moreno Carretero

DEPARTAMENTO: U128 - QUÍMICA INORGÁNICA Y ORGÁNICA

ÁREA: QUÍMICA ORGÁNICA

N. DESPACHO: B3 – 445

E-MAIL: mmoreno@ujaen.es

TLF: 953212738

Alumno: Daniel López Mecáñez

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

Específico

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.



UNIVERSIDAD DE JAÉN

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

Uno de los campos que más se han desarrollado dentro de la Química Inorgánica es la síntesis de complejos metálicos con la incorporación de ligandos multifuncionales, en especial, ligandos análogos de nucleobases o biomoléculas que aporten nuevos conocimientos en química estructural pero cuyo valor añadido es aumentar su potencial aplicación en campos como sensores analíticos, médicos, catálisis, imagen y propiedades biológicas. Es importante reforzar el papel de la química como disciplina para la comprensión de los eventos que tienen lugar mediante la aplicación de modelos químicos biomiméticos.

El monóxido de carbono (CO), de manera análoga al óxido nítrico (NO), es una molécula esencial que actúa como señal de comunicación en todas las células animales y vegetales y participa en el control de características tan importantes como la frecuencia de división celular, el tamaño de las células y el grado de adherencia intercelular [1-4]. Durante los últimos diez años, las investigaciones acerca del uso del monóxido de carbono en mamíferos han aumentado llegando a demostrarse que posee múltiples efectos como antiinflamatorio, antiproliferativo y vasodilatador.

Existe una gran diferencia en la reactividad del CO frente al NO [5]; así, a presión y temperatura ambiente y en ausencia de catalizadores especiales, el monóxido de carbono sólo se une a metales de transición mientras que el NO se unen tanto a centros metálicos como a constituyentes orgánicos de los sistemas biológicos.

Las moléculas dadoras de CO (carbon monoxide-releasing molecules, CORMs) son una clase de compuestos capaces de liberar cantidades controladas de CO en las células y tejidos presentando un amplio espectro de efectos farmacológicos. En particular, la presencia de grupos carbonilo unidos a metales de transición como rutenio, hierro o manganeso parecen hacer a los CORMs únicos en su transferencia de CO intracelular y amplificar las señales en los procesos en los que el CO interviene. Si a esto le unimos el uso de derivados de uracilo como sustituyentes en la esfera de coordinación, al presentar estas analogías estructurales con las bases del ADN, aportan ventajas como favorecer la internalización celular de estos compuestos [6-10].

6. HIPÓTESIS DE TRABAJO

Teniendo en cuenta el potencial que presentan este tipo de compuestos, pretendemos sintetizar y caracterizar nuevos complejos que puedan actuar como moléculas dadoras de CO. Para ello utilizaremos como núcleo metálico de partida el fragmento *fac*-tricarbonilrutenio(I); la estabilidad termodinámica y la cinética así como la biocompatibilidad la va a proporcionar un ligando derivado del uracilo, completando la esfera de coordinación con ligandos auxiliares que faciliten la salida del monóxido de carbono de la molécula.



UNIVERSIDAD DE JAÉN

7. BREVE DESCRIPCIÓN DE LAS ACTIVIDADES A REALIZAR

Con el presente trabajo se pretende sintetizar y caracterizar estructuralmente un derivado de uracilo, así como preparar y caracterizar una serie de carbonilos metálicos de Re(I). Para ello, el trabajo fin de grado estará dividido en las siguientes actividades:

Actividad 1: Búsqueda bibliográfica

Actividad 2: Síntesis y caracterización del ligando

Actividad 3: Síntesis y caracterización de los carbonilos metálicos

Actividad 4: Preparación del trabajo para su defensa

Para la caracterización, tanto del ligando como de los complejos obtenidos, se harán uso de las siguientes técnicas analíticas y espectroscópicas:

- Análisis elemental
- Espectroscopía infrarroja
- RMN de ^1H , ^{13}C , DEPT, HSQC, ^{13}C - ^1H HMBC y ^{15}N - ^1H HMBC
- Espectroscopía electrónica

8. DOCUMENTACIÓN/BIBLIOGRAFÍA

1. G. Caliendo, G. Cirino, V. Santagada y J.L. Wallace, *J. Med. Chem.*, 2010, 53, 6275-6286.
2. C. Szabo, *Sci Transl. Med.*, 2010, 2, 59ps54.
3. C. Peers y D.S. Steele, *J. Mol. Cell. Cardiol.*, 2012, 52, 359-365.
4. I. Andreadou, E. K. Iliodromitis, T. Rassaf, R. Schulz, A. Papapetropoulos y P. Ferdinandy, *Br. J. Pharmacol.*, 2015, 172, 1587-1606.
5. J.M. Fukuto, S.J. Carrington, D.J. Tantillo, J.G. Harrison, L.J. Ignarro y B.A. Freeman, *Chem. Res. Toxicol.*, 2012, 25, 769-793.
6. B. E. Mann, *Topics Organomet. Chem.*, 2010, 32, 242-285.
7. P. Peng, C. Wang, Z. Shi, V. K. Johns, Y. Ma, J. Oyer, *Org. Biomol. Chem.*, 2013, 11, 6671-6674.
8. R. Motterlini y B. E. Mann, Preparation of metal complexes for therapeutic delivery of carbon monoxide as vasodilator, Patent WO 2002/092075, 2002.
9. K. S. Davidge, G. Sanguinetti, C. H. Yee, B. E. Mann, R. Motterlini y R. K. Poole, *J. Biol. Chem.*, 2008, 284, 4516-4524.
10. T. R. Johnson, B. E. Mann, I. P. Teasdale, H. Adams, R. Foresti, C. J. Green y R. Motterlini, *Dalton Transactions*, 2007, 1500-1508.

9. CRONOGRAMA PROVISIONAL

El desarrollo del Trabajo fin de grado se realizará durante el primer cuatrimestre y las horas (aprox.) necesarias para la realización del mismo son las siguientes:



UNIVERSIDAD DE JAÉN

Actividad 1: Búsqueda bibliográfica	40 horas
Actividad 2: Síntesis y caracterización del ligando	60 horas
Actividad 3: Síntesis y caracterización de complejos metálicos	200 horas
Actividad 4: Preparación del trabajo para su defensa	75 horas

10. IMPLICACIONES ÉTICAS

El TFG requiere autorización de la Comisión de Ética: **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>