

**Anexo II**

**TITULACIÓN: Grado en Química**

**MEMORIA INICIAL DEL TRABAJO FIN DE GRADO**

**CENTRO: Facultad de Ciencias Experimentales**

**CURSO ACADÉMICO: 2014-15**



UNIVERSIDAD DE JAÉN  
Facultad de Ciencias Experimentales

**Título del Trabajo Fin de Grado:**

**SÍNTESIS DE DERIVADOS DE 4-AMINO-6-BENCILOXI-5-NITROSOPIRIMIDINAS**

**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)**

Antonio Marchal Ingraín y Justo Cobo Domingo

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

**Específico:** Experimental con Revisión bibliográfica

**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:**

**C13. Comprender las principales rutas sintéticas en química orgánica, incluyendo la interconversión de grupos funcionales y la formación de enlaces carbono-carbono y carbono heteroátomo.**

*\* Estas son las competencias mínimas. Añadir las competencias necesarias para cada Trabajo Fin de Grado propuesto*

**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**

Recientemente se ha descrito la síntesis de una serie de 5-nitrosopirimidinas [1,2] y evaluado su actividad como agentes antifúngicos y antibacterianos [3,4]. De todos los compuestos analizados, las pirimidinas **1-3** (ver figura 1) han demostrado actividad frente a varias cepas patógenas humanas siendo más activas como antibacterianos que como antifúngicos.

Estudios que relacionan las estructuras de las moléculas indicadas con su actividad demuestran la importancia sobre la actividad de un segundo anillo aromático, la asistencia del grupo nitroso y del enlace de hidrógeno intramolecular entre el oxígeno del grupo nitroso y el hidrógeno del grupo

amino en alfa del anillo pirimídínico.

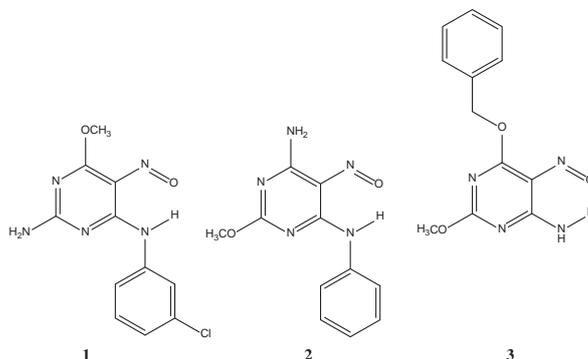
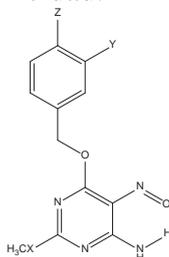


Figura 1

Sin embargo la aplicabilidad médica de estos compuestos se ve altamente limitada por su alta toxicidad aguda, por lo que resulta conveniente llevar a cabo modificaciones estructurales que permitan eliminar la toxicidad pero a su vez mantener la actividad antifúngica y/o antibacteriana.

## 6. HIPÓTESIS DE TRABAJO

Partiendo de procedimientos previamente descritos en la literatura [1-7] se pretende llevar a cabo el estudio de las condiciones más óptimas y sostenibles [8] que permitan obtener una serie de análogos a la 5-nitrosopirimidina **3** con alta pureza y en cantidades tales que sea factible llevar a cabo su caracterización mediante diferentes técnicas espectroscópicas (RMN, IR, EM, etc) y los correspondientes estudios de actividad y toxicidad.



## 7. BREVE DESCRIPCIÓN DE LAS ACTIVIDADES A REALIZAR

- 1.- Análisis y Revisión de la bibliográfica relacionada con los antecedentes y la hipótesis de trabajo.
- 2.- Selección de materiales.
- 3.- Realización del trabajo experimental
- 4.- Análisis, interpretación y discusión de resultados
- 5.- Elaboración de la Memoria de Trabajo de Fin de Grado
- 6.- Defensa del Trabajo de Fin de Grado

## 8. DOCUMENTACIÓN/BIBLIOGRAFÍA

(1) A. Marchal, M. Melguizo, M. Nogueras, A. Sánchez, J.N. Low., *J. Synlett*, **2002**, 2, 55-58.

- (2) A. Marchal, M. Nogueras, A. Sánchez, J.N. Low, L. Naesens, E. De Clercq, M. Melguizo, *Eur. J. Org. Chem.*, **2010**, 3823-3830.
- (3) M. Olivella, A. Marchal, M. Nogueras, A. Sánchez, M. Melguizo, M. Raimondi, S. Zacchino, F. Giannini, J. Cobo, R.D. Enriz, *Bioorg. Med. Chem.*, **2012**, 20, 6109-6122.
- (4) M. Olivella, A. Marchal, M. Nogueras, M. Melguizo, G. Lima, A. Tapia, G. Feresin, O. Parravicini, S. Andujar, J. Cobo, R.D. Enriz, *aceptado para publicación en Archiv der Pharmazie*. **2015**.
- (5) C. Glidewell, J.N. Low, A. Marchal, A. Quesada, *Acta Cryst.*, **2003**, C59, o454-0460.
- (6) M. Engelman, *Chem. Ber.* **1909**, 42, 177-182.
- (7) B.R. Baker, J. P. Joseph, R. E. Schaub, *J. Org. Chem.*, **1954**, 19, 631-637.
- (8) P. Cabildo, P. Cornago, C. Escolástico, S. Esteban, M.A. Farrán, M. Pérez, D. Sanz, *Procesos Orgánicos de bajo impacto ambiental. Química verde*. Madrid: Universidad Nacional de Educación a Distancia, **2006**.

### 9. CRONOGRAMA PROVISIONAL

Flexible. 10 horas semanales durante las 15 semanas del Segundo cuatrimestre. El alumno las distribuirá según su interés y los condicionamientos experimentales a lo largo de cada semana, pudiendo incluso acumular más horas en alguna semana a costa de otra.

### 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>