



**TRABAJOS FIN DE GRADO EN QUÍMICA (CURSO 19/20 – CASTELLANO)**  
**Aprobados por la Comisión de Docencia del Grado en Química en la sesión**  
**ordinaria del 4 de octubre de 2019**

**ÁREA DE QUÍMICA ANALÍTICA**

**QA01 Determinación de  $\beta_2$ -agonistas en muestras acuosas**

*Determination of  $\beta_2$ -agonists in aqueous samples*

Los  $\beta_2$ -agonistas son drogas sintéticas que fueron diseñadas para el tratamiento de enfermedades pulmonares, sin embargo, se ha observado que en dosis altas pueden tener un “efecto anabólico”. Actualmente existen diferentes regulaciones que controlan sus niveles en productos medicinales veterinarios, así como en controles antidopaje. Se pretende que el estudiante aborde la puesta a punto de un método de análisis para la identificación y cuantificación de varios compuestos  $\beta_2$ -agonistas en muestras acuosas.

**Tutora: Beatriz Fernández García**

**QA02 Determinación de compuestos orgánicos volátiles tóxicos en muestras acuosas**

*Determination of toxic volatile organic compounds in aqueous samples*

Los compuestos orgánicos volátiles (VOCs) son una clase de contaminantes que presentan un riesgo para la salud humana ya que pueden ser tóxicos a muy bajos niveles de concentración (ppb). El contenido de compuestos orgánicos volátiles en muestra de interés medioambiental, como pueden ser aguas de río, es actualmente de crucial importancia para controlar sus niveles. El estudiante seleccionará una estrategia analítica para llevar a cabo el análisis de BETX en muestras acuosas, buscando llevar a cabo la identificación y cuantificación de los compuestos presentes en la muestra.

**Tutora: Beatriz Fernández García**

**QA03 Estudio del contenido en calcio de diferentes quesos asturianos**

*Study of calcium content in different type of cheese from Asturias*

El calcio es un mineral esencial que tiene unas recomendaciones de consumo relativamente elevadas. Además, es muy importante que sus necesidades básicas estén cubiertas durante la infancia, adolescencia y vejez para evitar posibles enfermedades. Los alimentos con mejor biodisponibilidad de calcio son la leche y los derivados lácteos y una adecuada caracterización del contenido en calcio es necesaria para poder comercializar los productos. En este trabajo el estudiante propondrá un tratamiento de muestra así como una metodología analítica adecuada para la cuantificación de calcio en varios tipos de queso.

**Tutora: Beatriz Fernández García**

**QA04 Síntesis de nanoclústeres de oro fluorescentes y desarrollo de un método de bioconjugación para la determinación de proteínas**

*Synthesis of fluorescent gold nanoclusters and development of a bioconjugation method for proteins determination*

En las últimas décadas los avances en nanociencia y nanotecnología han alcanzado un alto grado de desarrollo en el mundo científico y presentan un impacto cada vez más apreciable en la sociedad actual. Los nanoclústeres metálicos son un nuevo tipo de nanomaterial fotoluminiscente con un diámetro menor a 3 nanómetros y formado por varias centenas de átomos. En este trabajo el estudiante llevará a cabo la síntesis de nanoclústeres de oro (AuNCs) fluorescentes y realizará su caracterización. Además, el estudiante propondrá un método



adecuado para la bioconjugación del AuNCs con anticuerpos específicos que permitan emplear los AuNCs como marca en la detección de proteínas en muestras de interés biológico.

**Tutora: Beatriz Fernández García**

**QA05 Determinación de fosfatos en muestras procedentes de vertidos de detergentes.**

*Determination of phosphates in samples from detergents wastes*

En las aguas naturales la presencia de fosfatos disueltos puede estimular el crecimiento no recomendable de micro- y macro-organismos acuáticos fotosintéticos. El origen de los fosfatos presentes en aguas naturales es diverso: restos de tratamientos en el suministro de aguas, residuos de fertilizantes, restos de limpiezas con detergentes fosforados, etc. En el caso de los detergentes, en su composición hay gran cantidad de fosfatos inorgánicos que contribuyen a alcalinizar los detergentes y aumentar la eficacia de estos productos. El estudiante propondrá una metodología analítica para llevar a cabo el análisis de fosfatos en muestras acuosas.

**Tutora: Beatriz Fernández García**

**QA06 Caracterización química del agua de los ríos asturianos**

*Chemical characterization of water from Asturian Rivers*

Conocer la calidad del agua de los ríos puede proporcionar a las autoridades competentes herramientas muy válidas para la gestión integral de las aguas así como para su adecuado control medioambiental. En este trabajo el estudiante llevará a cabo la toma de muestra, seleccionando agua de ríos asturianos con diferentes ambientes (p.e. rural y urbano). Además, el estudiante propondrá métodos analíticos para una correcta caracterización fisicoquímica de las aguas.

**Tutora: Beatriz Fernández García**

**QA07 Determinación de cloranfenicol basada en la interacción seroalbúmina-cloranfenicol empleando el triptófano como sonda luminiscente intrínseca**

*Determination of chloramphenicol based on the seroalbumin-chloramphenicol interaction using tryptophan as an intrinsic luminescent probe*

La seroalbúmina es la proteína más abundante en plasma en humanos y otros mamíferos. Varias biomoléculas y fármacos como el cloranfenicol se unen de manera reversible a las seroalbúminas que funcionan como transportadores, facilitando la transferencia de muchas de ellas desde la circulación sanguínea a órganos diana. Los aminoácidos triptófano, tirosina y fenilalanina son los responsables de su fluorescencia intrínseca. Se pretende que el alumno caracterice la interacción seroalbúmina-cloranfenicol y desarrolle una metodología para la determinación del antibiótico basada en dicha interacción.

**Tutora: Rosana Badía Laíño**

**QA08 Extracción, identificación y cuantificación del ácido ascórbico en verduras frescas**

*Extraction, identification and quantification of ascorbic acid in fresh vegetables*

El ácido L-ascórbico (AA) o vitamina C es un nutriente esencial para los humanos, ya que esta vitamina hidrosoluble interviene en procesos metabólicos y como cofactor en diversas reacciones enzimáticas. Su deficiencia puede desencadenar el escorbuto, enfermedad que era típica en los marinos por su escaso acceso a verduras y frutas frescas. El ácido está presente en forma natural en muchas frutas y verduras donde es interesante evaluar su contenido. En este trabajo se propone el desarrollo de un protocolo para la extracción, identificación y cuantificación del AA en verduras frescas como el brécol o el pimiento.

**Tutora: Rosana Badía Laíño**



#### **QA09 Determinación de triptófano en suplementos alimenticios**

##### *Determination of tryptophan in food supplements*

El triptófano es uno de los ocho aminoácidos esenciales necesarios para un correcto funcionamiento metabólico del organismo. Su déficit puede producir alteraciones en el estado de ánimo y en los niveles de serotonina que interviene en la regulación del ciclo circadiano. Hoy en día las farmacéuticas han desarrollado numerosos productos comerciales que se expenden como suplementos alimenticios conteniendo triptófano y se pretende que el estudiante aborde la puesta a punto de un método de análisis para la identificación y cuantificación del triptófano en este tipo de productos.

**Tutora: Rosana Badía Laíño**

#### **QA10 Desarrollo de una metodología para la identificación de productos acelerantes de la combustión**

##### *Development of a methodology for the identification of accelerant combustion products*

El análisis de evidencias físicas asociadas en particular con siniestros por incendios intencionados está relacionado directamente con la identificación de compuestos acelerantes de la combustión. Los acelerantes más frecuentes están relacionados con derivados de destilados de petróleo como gasolina o queroseno. Sin embargo, existen cada vez más en el mercado productos como insecticidas, abrillantadores, disolventes universales entre otros, que pueden actuar como combustibles acelerando la propagación de un incendio. Es importante por tanto poder identificar el origen del acelerante y por tanto se propone al alumno que desarrolle una metodología que permita determinar la naturaleza de los acelerantes más frecuentemente empleados.

**Tutora: Rosana Badía Laíño**

#### **QA11 Determinación del índice de peróxidos en aceites comerciales**

##### *Determination of the peroxide index in commercial oils*

Uno de los principales procesos que sufren muchos alimentos antes de ser ingeridos es su cocción empleando aceite a alta temperatura. La reutilización de un aceite que ha sufrido un tratamiento térmico genera ciertas controversias no sólo porque se pueden ver afectadas las características organolépticas del alimento sometido a cocción sino también por la eventual formación de productos de oxidación primarios y secundarios que resultan de la transformación de los ácidos grasos y que pueden tener efectos nocivos para la salud. El estudiante propondrá una metodología analítica que permita evaluar el estado de degradación de aceites comestibles comerciales sometidos a procesos térmicos.

**Tutora: Rosana Badía Laíño**

#### **QA12 Evaluación de la capacidad de resinas comerciales para la remoción de colorantes en muestras medioambientales**

##### *Evaluation of the capacity of commercial resins to remove dyes in environmental samples*

En la actualidad un gran número de colorantes se descargan al medioambiente provenientes principalmente de la industria textil donde se emplean para el teñido de los tejidos. La presencia de estos compuestos en vertidos, que llegan hasta los reservorios naturales, tiene un importante impacto en el equilibrio de los ecosistemas acuáticos dado que reduce el paso de la radiación solar así como desagradables efectos visuales. El alumno deberá proponer una metodología que permita evaluar la capacidad que tienen distintas resinas comerciales para la remoción de este tipo de compuestos en aguas naturales.

**Tutora: Rosana Badía Laíño**



## ÁREA DE QUÍMICA FÍSICA

### **QF01 Determinación experimental de la constante de formación del complejo Fe(III)-salicilato**

#### *Experimental determination of the formation constant of the Fe (III) -salicylate complex*

El complejo Fe(III)-salicilato es importante biológicamente como protector del catión metálico durante su recorrido en el interior de los seres vivos y como medio para tratar enfermedades relacionadas con el exceso de hierro. Se propone la determinación de la constante del equilibrio de formación de este complejo, en términos de concentraciones, diseñando un protocolo experimental adecuado. Los datos experimentales se tratarán mediante ajustes lineales y no lineales.

**Tutora: M. Isabel Menéndez Rodríguez**

### **QF02 Aplicación del método crioscópico para determinar masas atómicas y moleculares.**

#### *Application of the cryoscopic method to determine atomic and molecular weight.*

El descenso crioscópico producido por la presencia de un soluto no volátil en una disolución permite determinar la masa atómica/molecular de dicho soluto. Se propone trabajar con solutos atómicos y moleculares en disolventes adecuadamente seleccionados y diseñar el protocolo experimental que permite determinar su masa atómica/molecular por crioscopía.

**Tutora: M. Isabel Menéndez Rodríguez**

### **QF03 Eliminación de contaminantes acuosos por adsorción**

#### *Elimination of aqueous contaminants by adsorption*

La adsorción sobre superficies sólidas de especies en disolución permite reducir fácilmente la concentración de las especies disueltas. Este procedimiento es especialmente útil cuando se trata de sustancias contaminantes. Se propone diseñar experimentos para cuantificar y caracterizar el proceso de adsorción de diversas especies contaminantes tanto cuando se presentan de forma aislada como cuando todas ellas se encuentran en la disolución.

**Tutora: M. Isabel Menéndez Rodríguez**

### **QF04 Estudio cinético de la iodación de acetona**

#### *Kinetic study of acetone iodination*

Se propone aplicar el método de las velocidades iniciales para determinar los parámetros implicados en la ecuación de velocidad de la reacción de iodación de la acetona en un medio de pH adecuado, así como sugerir el mecanismo a través del cual ocurre la reacción. La naturaleza de los reactivos y/o productos determinará el procedimiento experimental más apropiado para estudiar esta cinética.

**Tutora: M. Isabel Menéndez Rodríguez**

### **QF05 Estudio teórico de la adición de dioxolanos a alquinos catalizada por oro**

#### *Theoretical study of the addition of dioxolanes to gold-catalyzed alkynes*

Los compuestos de oro(I) tienen la capacidad de activar alquinos preparándolos para un ataque electrofílico. En este trabajo se propone estudiar teóricamente la adición de compuestos cíclicos di-oxigenados a alquinos activados por oro. El estudiante se iniciará en el manejo de programas de visualización de estructuras y del programa Gaussian para la realización de cálculos químicos cuánticos. Con él se localizarán los intermedios y estados de transición implicados en la reacción y se analizarán aspectos cinéticos y termodinámicos relacionados con la misma.

**Tutora: M. Isabel Menéndez Rodríguez**



**QF06 Síntesis, Estructuras y Caracterización de Materiales Órgano-Inorgánicos**  
*Synthesis, Structure and Characterization of Metal Organic Frameworks*

En el transcurso de la última década, el avance en la obtención de nuevos materiales multifuncionales que posean propiedades físicas o químicas han sido objeto de un desarrollo vertiginoso. Dentro de estos nuevos materiales, se encuentra una clase de compuestos cristalinos denominados MOFs (Metal Organic Frameworks). Los MOFs, materiales constituidos por redes metalorgánicas donde los cationes metálicos (individuales o en forma de clúster) se encuentran conectados por moléculas orgánicas, han tenido gran proyección y desarrollo de las últimas décadas, debido a potenciales aplicaciones derivadas de sus estructuras porosas abiertas. En la presente propuesta de TFG, siguiendo técnicas de síntesis hidrotermal, se prepararán nuevos MOFs constituidos por cationes de elementos lantánidos o metales de transición, como centros metálicos, y los ligandos carboxilato como agentes conectores. Además de la síntesis, se realizará la caracterización estructural mediante difracción de rayos X de monocristal y de polvo, espectroscopía infrarroja, análisis térmico (TGA) y microscopía electrónica.

**Tutora: M. Isabel Menéndez Rodríguez**

**QF07 Buscando el xenón desaparecido en el manto terrestre: estudio termodinámico.**  
*Searching for the missing xenon in the earth's mantle: a thermodynamic study.*

La mayoría de los gases nobles en la atmósfera terrestre están presentes en cantidades similares a la de las condritas carbonáceas, meteoritos de composición similar a la de nuestro planeta. Sin embargo, el contenido de xenón es unas 10 veces más bajo del esperado, lo que indica que puede estar atrapado en el interior del planeta. En este trabajo, examinamos computacionalmente la estabilidad de inclusiones de xenón en varios materiales comunes en el manto terrestre con el fin de determinar posibles composiciones que expliquen la ausencia de este gas en nuestra atmósfera. [Zhu et al., Nature Chem. 6 (2014) 644-648]

**Tutor: Alberto Otero de la Roza**

**QF08 Emergencia de quiralidad a partir de compuestos aquirales y el origen de la homoquiralidad biológica**

*Emergence of chirality from no-chiral compounds and the origin of biological homogeneity*

El origen de la homoquiralidad biológica - que solo los aminoácidos quirales L- y los azúcares D- están presentes en los seres vivos - es todavía desconocido. Una de las teorías para explicar la emergencia espontánea de la homoquiralidad en el caldo primitivo es la amplificación autocatalítica del exceso enantiomérico y la transmisión de esta quiralidad a través de agregados de amino ácidos como el octámero de serina. En este trabajo, examinamos computacionalmente la estabilidad de agregados pequeños de amino ácidos de distintos tipos y su posible relación con el origen de la homoquiralidad. [Nanita et al., Angew. Chem. Int. Ed. 45 (2006) 554-569].

**Tutor: Alberto Otero de la Roza**

**QF09 La ecuación de Hammett y relaciones de energía libre para reacciones orgánicas simples**

*The Hammett equation and free energy relationships for simple organic reactions*

Las relaciones de energía libre son expresiones lineales obtenidas empíricamente que relacionan el logaritmo de la constante de equilibrio con el de la constante de velocidad de una familia de reacciones orgánicas. La ecuación de Hammett es una relación de energía libre que da las constantes de equilibrio y cinéticas de reacciones que involucran a derivados del ácido benzoico en función de sus sustituyentes. En este trabajo, reproducimos computacionalmente la ecuación de Hammett y estudiamos los efectos electrónicos de cada uno de sus sustituyentes utilizando cálculos mecanocuánticos. [Hammett equation, en IUPAC Compendium of Chemical Terminology, 2nd ed. (the "Gold Book")]

**Tutor: Alberto Otero de la Roza**





**QF10 Desarrollo de algoritmos para cálculos de similitud en macromoléculas y cristales**

*Development of algorithms for similarity calculations in macromolecules and crystals*

La comparación estructural de moléculas y cristales es fundamental en el estudio de sistemas biológicos y el diseño de fármacos y materiales organoelectrónicos. Comparar las estructuras de dos moléculas grandes (o dos cristales) es difícil por la gran cantidad de átomos presentes, así que es necesario desarrollar métodos computacionales que cuantifiquen el grado de similitud entre dos estructuras. En este trabajo, exploramos los diferentes métodos para llevar a cabo esta tarea e implementamos algunos de los más sencillos en un programa utilizando octave. [Nikolova et al. QSAR Comb. Sci. 22 (2003) 1006-1026]

**Tutor: Alberto Otero de la Roza**

**QF11 Uso de árboles k-d para el cálculo de distancias en moléculas y cristales en tiempo logarítmico**

*Use of k-d trees to calculate distances in molecules and crystals in logarithmic time*

Las simulaciones computacionales en moléculas biológicas a menudo utilizan "campos de fuerza", expresiones para la energía que se obtienen como suma sobre todos los pares de átomos en el sistema. El coste computacional del cálculo de esta energía viene determinado mayormente por el cálculo de todas las distancias interatómicas, que escala como el cuadrado del número de átomos en el sistema. En muchas ocasiones, la contribución de un par de átomos es despreciable si están lo suficientemente lejos, así que es posible utilizar métodos que descarten a priori átomos suficientemente lejanos. En este trabajo, examinamos e implementamos el uso de árboles k-dimensionales, una estructura de datos que permite el mencionado cálculo de distancias en tiempo logarítmico, para el cálculo de los entornos atómicos en una macromolécula. [Bentley, Commun. ACM. 18 (1975) 509-517; Allen y Tildesley, Computer simulation of liquids (2a edición), Oxford University Press, 2017]

**Tutor: Alberto Otero de la Roza**

**QF12 Estudio computacional de los efectos aurofílicos y metalofílicos.**

*Computational study of the aurophilic and metalophilic effects.*

Debido a los importantes efectos relativistas, el oro muestra un comportamiento característico y diferente de sus vecinos en la tabla periódica. El oro(I) prefiere formar complejos lineales en los que comparte su electrón de valencia (6s) con un ligando neutro (por ejemplo, una fosfina) y recibe un par de electrones de un ligando aniónico (e.g. un cloruro). Al cristalizar, los complejos de oro suelen formar agregados con presencia de contactos no-covalentes Au(+)-Au(+) a pesar de la carga positiva formal de ambos. Este efecto, llamado interacción aurofílica o metalofílica, está también presente, aunque de forma menos intensa, en complejos de otros metales (Ir, Pt, Hg, Tl, Ag). En este trabajo, estudiamos computacionalmente el origen de las interacciones metalofílicas y su intensidad en función de los ligandos y del metal. [Otero-de-la-Roza, J. Chem. Phys. 140 (2014) 18A504]

**Tutor: Alberto Otero de la Roza**

## ÁREA DE QUÍMICA INORGÁNICA

**QI01 Síntesis y caracterización de clusters carbonílicos de rutenio de alta nuclearidad**

*Synthesis and characterization of high nuclearity ruthenium carbonyl clusters*

En los últimos años se han producido grandes avances en la química de coordinación de clusters carbonílicos de rutenio. Se han preparado miles de estos clusters, desde muy sencillos a muy complejos (en términos de nuclearidad, estructura y tipo y número de ligandos coordinados). Estos estudios han proporcionado gran cantidad de información relacionada con el enlace entre metales, la estabilidad preferente de ciertos esqueletos metálicos, procesos de agregación y



fragmentación, transformaciones de ligandos coordinados cuando se unen a muchos metales (difíciles de replicar utilizando complejos mononucleares) y el uso de clusters en reacciones catalíticas. En el contexto del presente TFG, el alumno realizará una revisión bibliográfica sobre los clusters carbonílicos de rutenio, en particular de aquellos de alta nuclearidad (con más de 3 metales). Posteriormente, se escogerán ejemplos de estos compuestos para su preparación y caracterización en el laboratorio.

**Tutores: Pablo García Álvarez / Alejandro Presa Soto**

#### **QI02 Sustitución macromolecular en polifosfacenos. Control de la rigidez de las cadenas poliméricas**

##### ***Macromolecular substitution on polyphosphazenes. Control of the main chain stiffness***

Los polifosfacenos son polímeros con una cadena principal basada en la repetición de unidades  $[N=PR_2]$ . Los grupos laterales R controlan las propiedades finales del polifosfaceno sintetizado. Aunque existen diversas metodologías para preparar este tipo de polímeros, la sustitución nucleófila macromolecular representa la ruta más conveniente hacia polifosfacenos bien definidos. De entre las propiedades más destacadas de estos materiales, destaca la amplia variedad de temperaturas de transición vítrea que pueden ser obtenidas eligiendo adecuadamente los sustituyentes R. En el contexto del presente TFG, el alumno realizará una revisión bibliográfica completa sobre la síntesis y reactividad de estos polímeros y, posteriormente, se escogerán ejemplos adecuados, que muestren la mencionada variedad de temperaturas de transición vítrea, para su preparación en el laboratorio.

**Tutores: Pablo García Álvarez / Alejandro Presa Soto**

#### **QI03 Tetrilenos pesados como ligandos en química de coordinación**

##### ***Heavier tetrylenes as ligands in coordination chemistry***

Los compuestos neutros que contienen un elemento del grupo 14 (carbono, silicio, germanio, estaño o plomo) con seis electrones en su capa de valencia se denominan tetrilenos. Los tetrilenos de carbono son los carbenos y los de silicio, germanio, estaño y plomo se conocen, de modo general, como tetrilenos pesados (TPs) y, en particular, como sililenos, germilenos, estannilenos y plumbilenos, respectivamente. El hecho de tener seis electrones en su capa de valencia hace que estas especies sean insaturadas y por lo tanto muy reactivas. Los tetrilenos pesados ofrecen patrones de reactividad diferentes a los de los carbenos pero, al igual que ellos, también se pueden coordinar a metales de transición. En el contexto del presente TFG, el alumno realizará una revisión bibliográfica sobre los tetrilenos pesados, en particular sobre su uso como ligandos en química de coordinación. Posteriormente, se escogerá un ejemplo de un TP (en concreto de un estannileno sencillo) para la preparación y caracterización en el laboratorio de dicho ligando y de alguno de sus complejos metálicos.

**Tutores: Pablo García Álvarez / Alejandro Presa Soto**

#### **QI04 Complejos de oro con carbenos-N heterocíclicos (CNHs) en catálisis homogénea**

##### ***N-heterocyclic carbenes (NHCs) gold complexes in homogenous catalysis***

Los catalizadores de oro son una de las herramientas más importantes para la síntesis de compuestos orgánicos, destacando por ser los más efectivos en la activación electrofílica de alquinos. Los primeros catalizadores de oro empleados, en concreto de Au(I), empleaban ligandos auxiliares como las fosfinas o los fosfitos. Actualmente, el uso de CNHs está ganando mayor popularidad, fundamentalmente porque permite la obtención de catalizadores de Au(I) más estables y más activos. En el contexto del presente TFG, el alumno realizará una revisión bibliográfica sobre el uso de complejos de oro como catalizadores en transformaciones orgánicas, poniendo especial hincapié en aquellos provistos de CNHs como ligandos auxiliares. Posteriormente, se escogerá un ejemplo de un complejo CNH-Au para su preparación y caracterización en el laboratorio y se evaluará su actividad catalítica en un proceso concreto.



**Tutores: Pablo García Álvarez / Alejandro Presa Soto**

**QI05 Polimerización aniónica de estireno en Mezclas Eutécticas.**

*Anionic polymerization of styrene using eutectic mixtures.*

La polimerización aniónica de estireno utilizando disolventes orgánicos convencionales, debe realizarse en condiciones de total ausencia de humedad y oxígeno. En estas condiciones, se consigue un excelente control sobre las propiedades macromoleculares del polímero final. Recientemente, han surgido rutas sintéticas basadas en iniciadores aniónicos, que conducen a poliestirenos en condiciones experimentales mucho menos restrictivas. Algunas de ellas hacen uso de los denominados Líquidos Eutécticos Profundos (Deep Eutectic Solvents, DES). En el contexto del presente TFG, el alumno realizará una revisión bibliográfica completa sobre las polimerizaciones aniónicas de poliestirenos tanto en disolventes orgánicos convencionales como en DES. Posteriormente, se escogerán condiciones adecuadas para realizar un estudio comparativo de las propiedades de los poliestirenos sintetizados por ambas rutas.

**Tutores: Pablo García Álvarez / Alejandro Presa Soto**

**QI06 Complejos de manganeso activos en la reducción electrocatalítica de CO<sub>2</sub>**

*Manganese complexes for the electrocatalytic reduction of CO<sub>2</sub>*

Los combustibles fósiles, hasta que se generalice el uso de energías renovables (solar, eólica, geotérmica, etc.) se seguirán usando como vía principal para producir energía durante las siguientes décadas. Por esta razón, para reducir las enormes cantidades de CO<sub>2</sub> que se liberan anualmente a la atmósfera y así ralentizar el cambio climático, es necesario encontrar procesos limpios que utilicen este gas de efecto invernadero para producir combustibles líquidos y compuestos orgánicos de alto valor añadido. Complejos tricarbonílicos de manganeso(I) han demostrado ser muy eficientes en la reducción electrocatalítica de CO<sub>2</sub> a CO, uno de los componentes del gas de síntesis (CO + H<sub>2</sub>), que se usa para la producción de hidrocarburos. En el contexto del presente TFG, el alumno realizará una revisión bibliográfica sobre los procesos existentes para la conversión de CO<sub>2</sub> en compuestos orgánicos de más valor, prestando especial atención en la reducción electrocatalítica utilizando catalizadores de manganeso. Posteriormente, se escogerá uno o varios ejemplos de complejos de manganeso para su preparación y caracterización en el laboratorio.

**Tutores: Pablo García Álvarez / Alejandro Presa Soto**

**QI07 Ligandos escorpionato**

*Scorpionate ligands*

En 1996, el químico de ascendencia ucraniana Swiatoslaw Trofimenko, describió una nueva clase de ligandos tridentados, los escorpionatos. El término escorpionato viene del hecho de que estos ligandos se coordinan a los metales de manera análoga a como un escorpión se dispone a picar a sus presas (dos grupos dadores situados en el mismo plano simulan las pinzas del escorpión y el tercero, situado por encima de ese plano, su aguijón). Los ligandos escorpionatos se han empleado en la preparación de gran variedad de complejos metálicos, muchos de los cuales han demostrado ser catalizadores activos en procesos de interés (por ejemplo, polimerizaciones y oligomerizaciones) y también como modelos de complejos biológicamente activos (por ejemplo, enzimas). En el contexto del presente TFG, el alumno realizará una revisión bibliográfica sobre la química de coordinación y aplicaciones de los ligandos escorpionato. Posteriormente, se escogerá un escorpionato del tipo tris(pirazolil)borato (la clase más importante) para la preparación y caracterización en el laboratorio de dicho ligando y de alguno de sus complejos metálicos.

**Tutores: Pablo García Álvarez / Alejandro Presa Soto**





### **QI08 Síntesis de precursores catalíticos de paladio(0)**

#### ***Synthesis of palladium(0) catalytic precursors***

El paladio fue descubierto en 1803 por William Hyde Wollaston, que le dio el nombre de paladio en honor del asteroide Palas, que había sido descubierto en las mismas fechas. En la actualidad el principal uso del paladio se encuentra en la industria automovilística (77 % de la demanda en 2017), en donde se utiliza para el desarrollo de convertidores catalíticos que reducen las emisiones de gases contaminantes. Sin embargo, esta no es la única aplicación del paladio en procesos catalíticos, dónde destaca además como catalizador en reacciones de hidrogenación (en estado metálico) y en multitud de reacciones de acoplamiento cruzado (como complejo organometálico). Ilustrando la importancia de la química organometálica del paladio, el premio Nobel de Química del año 2010 se concedió a Richard F. Heck, Eiichi Negishi y Akira Suzuki por “su contribución al desarrollo de métodos sintéticos catalizados por complejos de paladio,” que han permitido la preparación de miles de compuestos orgánicos de gran utilidad. En el contexto del presente TFG, el alumno realizará una revisión bibliográfica sobre la química del paladio, haciendo especial hincapié sobre su química de coordinación y aplicaciones en catálisis. Posteriormente, se escogerá algún complejo organometálico de paladio catalíticamente activo, en concreto en estado de oxidación cero, para su preparación y caracterización en el laboratorio y se evaluará su actividad catalítica en un proceso concreto.

**Tutores: Pablo García Álvarez / Alejandro Presa Soto**

### **QI09 Reacciones catalíticas de acoplamiento entre acetilenos terminales y clorofosfinas**

#### ***Coupling catalytic reactions between terminal acetylenes and chlorophosphine derivatives***

La reacción de acoplamiento catalítico de clorofosfinas y acetilenos terminales da lugar a compuestos organofosforados muy útiles tanto en síntesis orgánica como inorgánica. En síntesis orgánica, estos derivados organofosforados se utilizan como precursores de alqueni- y alquilfosfinas, así como de heterociclos fosforados. En síntesis inorgánica se emplean en la preparación de homo- y hetero-complejos tipo puente, metalaciclos y clusters metálicos. En el contexto de este TFG, se revisarán los métodos de síntesis de estos derivados, los aspectos más destacables de su química, y se desarrollará una práctica para su desarrollo en el laboratorio.

**Tutores: Pablo García Álvarez / Alejandro Presa Soto**

### **QI10 Catalizadores de iridio para la deshidrogenación sin aceptores de alcoholes**

#### ***Iridium catalysts for the acceptorless alcohol dehydrogenation***

La deshidrogenación de alcoholes sin aceptores (AAD por su traducción al inglés) con la liberación de H<sub>2</sub> es una de las rutas sintéticas más prometedoras y eficientes (no requiere de oxidantes) para transformar alcoholes en compuestos carbonílicos de interés, como aldehídos, cetonas, ésteres y amidas. Además, con importantes implicaciones en el campo de las energías renovables, esta reacción permite utilizar alcoholes derivados de la biomasa, que se pueden almacenar y transportar de modo seguro, para la liberación de H<sub>2</sub> y su posterior uso como combustible limpio. En el contexto del presente TFG, el alumno realizará una revisión bibliográfica sobre la deshidrogenación de alcoholes sin aceptores, haciendo especial hincapié en los catalizadores que se emplean en la misma. Posteriormente, se escogerá algún complejo organometálico de iridio (uno de los metales más activos en este proceso) catalíticamente activo, para su preparación y caracterización en el laboratorio y se evaluará su actividad catalítica en la deshidrogenación de alcoholes.

**Tutores: Pablo García Álvarez / Alejandro Presa Soto**

### **QI11 Síntesis y reactividad de (4-bromofenil)difenilfosfina.**

#### ***Synthesis and reactivity of (4-bromophenyl)diphenylphosphine.***

La (4-bromofenildifenil)fosfina es un derivado fosforado muy versátil ya que permite la preparación de un alto número de fosfinas sustituidas por reacción directa. En el contexto de



este TFG, se revisarán los métodos de síntesis de este derivado, los aspectos más destacables de su química, y se elegirán convenientemente uno o varios derivados para su preparación en el laboratorio.

**Tutores: Pablo García Álvarez / Alejandro Presa Soto**

#### **QI12 El ligando tropilio en química de coordinación**

##### *Tropilium ligand in coordination chemistry*

La síntesis accidental del ferroceno en 1952, complejo tipo sándwich de hierro con dos ligandos  $\eta^5$ -ciclopentadienilo, impulsó el rápido crecimiento de la Química Organometálica. Desde entonces, se prepararon multitud de complejos entre metales de transición y compuestos orgánicos insaturados, que se unían a los mismos de manera polidentada actuando como ligandos  $\sigma$ -dadores- $\pi$ -acceptores. Así, surgieron los complejos tipo sándwich (con dos ligandos cíclicos polidentados) o semi-sandwich (con solo uno), siendo los provistos de ciclos de seis (tipo areno) y cinco miembros (tipo ciclopentadienilo), los más comunes. En el contexto del presente TFG, el alumno realizará una revisión bibliográfica sobre la química organometálica derivada de complejos tipo sándwich y semi-sandwich, haciendo especial hincapié en sus métodos de síntesis y en la variabilidad de ligandos polidentados disponible. Posteriormente, se escogerá algún complejo organometálico que contenga un ligando cíclico heptadentado (tipo tropilio), menos usado que los tipo areno o ciclopentadienilo, para su preparación y caracterización en el laboratorio.

**Tutores: Pablo García Álvarez / Alejandro Presa Soto**

### ÁREA DE QUÍMICA ORGÁNICA

#### **QO01 Síntesis y aislamiento de la sal *p*-toluensulfónica de (*S*)-*N*-(1-feniletíl)hidroxilamina** *Synthesis and isolation of the *p*-toluenesulfonic salt of (*S*)-*N*-(1-phenylethyl)hydroxylamine*

Las hidroxilaminas son un grupo de compuestos químicos muy empleados en síntesis orgánica como precursores de moléculas más complejas. En este trabajo se propone llevar a cabo la transformación de la (*S*)-1-feniletilamina en una sal de hidroxilamina, a través de procesos químicos que permitan un sencillo aislamiento de los intermedios y del producto final. Se hará empleo de un método de oxidación en condiciones suaves de reacción para evitar la formación de subproductos no deseados.

**Tutor: Iván Lavandera**

#### **QO02 Alcaloides *Cinchona*. Preparación de 3-etilpiperidin-4-ona, intermedio en la síntesis de dihidrocinchonina y dihidrocinchonidina** *Cinchona alkaloids. Preparation of 3-ethylpiperidin-4-one, intermediate in the synthesis of dihydrocinchonine and dihydrocinchonidine*

Los alcaloides obtenidos de plantas del género *Cinchona* han sido ampliamente estudiados debido a sus propiedades medicinales y a su utilidad en el contexto de la organocatálisis. Un ejemplo típico de este tipo de productos naturales es la quinina, que además de usarse tradicionalmente en el tratamiento de la malaria, se emplea como aditivo de algunas bebidas refrescantes para reforzar su sabor amargo. En este trabajo se plantea la síntesis de un compuesto que ha sido usado en la síntesis algunos de estos alcaloides *Cinchona*.

**Tutor: Félix Rodríguez Iglesias**

**QO03 Síntesis selectiva de (1R,2R,3S,4R,6S)-1,3-dimetil-4-(prop-1-en-2-il)-7-oxabicyclo[4.1.0]heptan-2-ol. Aplicaciones en la síntesis de derivados de la vitamina D**

*Selective synthesis of (1R,2R,3S,4R,6S)-1,3-dimethyl-4-(prop-1-en-2-yl)-7-oxabicyclo[4.1.0]heptan-2-ol. Applications in the synthesis of vitamin D derivatives*

Los derivados de la vitamina D forman un amplio grupo de compuestos orgánicos con aplicaciones médicas probadas en muy distintas enfermedades como la osteoporosis, artritis, la psoriasis o el cáncer. En este trabajo se propone la modificación de la (R)-carvona para la obtención de un síntón precursor del anillo A del calcitriol metilado en su posición C-2.

**Tutor: Iván Lavandera García**

**QO04 Síntesis del ácido (2-ciclooctin-1-iloxi)acético para su uso en bioconjugación**

*Synthesis of (2-cyclooctyn-1-yloxy)acetic acid for its use in bioconjugation*

La bioconjugación es una estrategia sintética moderna que permite la unión de dos moléculas, donde al menos una de ellas es una biomolécula, para generar un nuevo sistema que combina las propiedades individuales de cada componente. La bioconjugación se ha convertido en una herramienta fundamental en el contexto de la Química Médica y Bioquímica. Coincidiendo con el desarrollo del concepto de "Click Chemistry", el interés de las moléculas que contienen en su estructura un anillo de ciclooctino para uso en bioconjugación ha crecido exponencialmente en los últimos años. El objetivo de este trabajo es precisamente la síntesis de un compuesto que contiene dicho anillo.

**Tutor: Félix Rodríguez Iglesias**

**QO05 Síntesis de 2-[4-(1-hidroxietil)-1H-1,2,3-triazol-1-il]-1-feniletanol racémico empleando química de tipo click**

*Synthesis of racemic 2-[4-(1-hydroxyethyl)-1H-1,2,3-triazol-1-yl]-1-phenylethanol using click chemistry*

Los derivados de triazol han demostrado tener gran potencial aplicados a la química farmacéutica o de materiales. En este trabajo se plantea la síntesis de un derivado de triazol racémico con dos grupos hidroxilo partiendo de los correspondientes compuestos que contengan los grupos reactivos adecuados para, tras un proceso de química de tipo click, se obtenga directamente el compuesto o un precursor del derivado de interés.

**Tutor: Iván Lavandera García**

**QO06 Preparación de (E)-4-(2,6-dimetoxi-4-pentilfenil)but-3-en-2-ona en el contexto de la síntesis de cannabinoides**

*Preparation of (E)-4-(2,6-dimethoxy-4-pentylphenyl)but-3-en-2-one in the context of the synthesis of cannabinoids*

Las plantas del género *Cannabis* han sido utilizadas por los humanos desde la era neolítica debido, fundamentalmente, a sus propiedades terapéuticas. El término cannabinoide hacía referencia originalmente a los metabolitos secundarios encontrados en la planta del cannabis y que eran los responsables de las propiedades terapéuticas aludidas anteriormente. En este trabajo se plantea la preparación de un compuesto que ha sido usado recientemente en la síntesis algunos de estos cannabinoides.

**Tutor: Félix Rodríguez Iglesias**

**QO07 Síntesis y aislamiento de cis-but-2-en-1,4-diamina**

*Synthesis and isolation of cis-but-2-en-1,4-diamine*

Entre las propiedades de las 1,ω-diaminas destaca su papel como precursores de polímeros. Asimismo, estas diaminas han sido utilizadas en procesos de alto valor sintético con biocatalizadores aplicados a la obtención de compuestos quirales. En este trabajo se plantea la síntesis y el aislamiento de una diamina a partir de un compuesto fácilmente accesible y a través



de reacciones sencillas. Asimismo, será necesaria la purificación de este compuesto para separarlo del isómero *trans*.

**Tutor: Iván Lavandera García**

**QO08 Heterociclos nitrogenados insaturados de pequeño tamaño. Síntesis de 2,3-difenil-2H-azirina**

*Small unsaturated nitrogen heterocycles: Synthesis of 2,3-diphenyl-2H-azirine*

Las 2H-azirinas son los heterociclos nitrogenados insaturados más pequeños. Aunque son moléculas muy tensionadas, su estructura se puede observar en algunos productos naturales. Además, poseen una reactividad muy rica pudiendo reaccionar tanto con nucleófilos como con electrófilos en procesos dominados por la liberación de la tensión de anillo. En este trabajo se plantea la preparación de un compuesto que pertenece a esta familia de heterociclos.

**Tutor: Félix Rodríguez Iglesias**

**QO09 Síntesis de  $\alpha$ -bromociclohex-2-enona y de  $\alpha$ -iodociclohex-2-enona, precursores de sesquiterpenos**

*Synthesis of  $\alpha$ -bromocyclohex-2-enone and  $\alpha$ -iodocyclohex-2-enone, precursors of sesquiterpenes*

Se plantea en este trabajo la síntesis de dos cetonas cíclicas muy empleadas como precursoras de compuestos de alto interés biológico, como son los derivados de sesquiterpeno *echinopines* A y B1 o el producto natural (+)-*trans*-195A, perteneciente a la familia de los alcaloides. El estudiante deberá diseñar síntesis eficientes y cortas a partir de productos fácilmente accesibles para la obtención de los productos finales.

**Tutor: Iván Lavandera García**

**QO10 Síntesis del protector gástrico Rebamipide**

*Synthesis of the gastro-protective drug Rebamipide*

Rebamipide es probablemente en la actualidad el fármaco más eficaz en el tratamiento de úlceras gástricas y otras afecciones relacionadas. También ha resultado muy útil en el contexto de la oftalmología para el tratamiento del síndrome de ojo seco. Teniendo en cuenta los principios de la Química Verde, el estudiante deberá diseñar y llevar a cabo una síntesis eficiente de este compuesto a partir de productos fácilmente asequibles.

**Tutor: Félix Rodríguez Iglesias**

**QO11 Obtención de la oxima y la hidrazona del 3,4-dihidroxibenzaldehído, compuestos derivados de la lignina**

*Preparation of the oxime and hydrazone of 3,4-dihydroxybenzaldehyde, compounds derived from lignin*

En los últimos años se están buscando fuentes alternativas de energía y materiales que puedan ser fácilmente accesibles y medioambientalmente benignas. Entre ellas, cabe destacar a la lignina, puesto que forma parte de la estructura de plantas y por lo tanto se puede obtener en grandes cantidades. En este trabajo se plantea la síntesis de dos compuestos provenientes de la lignina y que pueden ser obtenidos a partir de precursores fácilmente accesibles, aislándose y caracterizándose los posibles intermedios.

**Tutor: Iván Lavandera García**

**QO12 Catalizadores multinucleares. Síntesis y aplicación del ligando (R)-3,3'-bis(difenilfosfino)-[1,1'-binaftaleno]-2,2'-diol**

*Multinuclear catalysts. Synthesis and application of the ligand (R)-3,3'-bis(diphenylphosphaneyl)-[1,1'-binaphthalene]-2,2'-diol*

El uso de complejos multinucleares en el contexto de la catálisis supone uno de los enfoques modernos en el desarrollo de procesos más eficientes. Estos catalizadores se benefician de las



propiedades de los diferentes metales que constituyen el complejo. En este trabajo se propone la síntesis de un ligando que se ha usado en reacciones de adición conjugada asimétrica de compuestos organometálicos de zinc a cetonas insaturadas. El estudiante deberá diseñar y llevar a cabo una síntesis eficiente de este ligando y probar su funcionamiento en una reacción asimétrica.

**Tutor: Félix Rodríguez Iglesias**