# Máster universitario en Química Orgánica (M60)

## Relación de Trabajos de Investigación (30 ECTS) ofertados por la UAM

CURSO ACADÉMICO 2021-2022

Universidad Autónoma de Madrid

# Listado y propuestas detalladas de TFM 2021-2022 del Departamento de Química Orgánica

| Director(es) | Título del proyecto |
|---|---|
| **1.** HENNRICH, GUNTHER/ GUTIERREZ-PUEBLA, ENRIQUE | *Materiales cristalinos usando enlaces de hidrogeno y halógeno: química supramolecular e ingeniera cristalina* |
| **2.** DE JUAN GARRUDO, ALBERTO | *Capsulas Moleculares con Propiedades Fotocatalíticas* |
| **3.** MARZO, LEYRE /SALAVERRI, NOELIA | *Nuevas reacciones fotocatalíticas enantioselectivas para la síntesis de compuestos farmacológicamente activos* |
| **4.** DE LA ESCOSURA NAVAZO, ANDRÉS / GUISÁN CEINOS, SANTIAGO | *Polimerización supramolecular y autocatálisis controlada por luz con derivados de azobenceno portadores de bases nitrogenadas* |
| **5.** VELA GALLEGO, SONIA / DE LA ESCOSURA NAVAZO, ANDRÉS | *Síntesis y autocatálisis de quimeras moleculares compuestas por aminoácidos, ácidos grasos y bases nitrogenadas* |
| **6.** FERNÁNDEZ SALAS, José A. | *Desarrollo de nuevas metodologías electroquímicas para la formación de enlaces carbono-carbono* |
| **7.** MARCOS ALGABA, Vanesa | *Desarrollo de Materiales Inteligentes para Fotocatálisis* |
| **8.** BOTTARI, GIOVANNI / FERNÁNDEZ VERA, ÓSCAR | *Ampliando la química del tetracianobuta-1,3-dieno (TCBD): Síntesis y estudio de nuevos derivados de TCBD fusionados a grupos antrilos* |
| **9.** CID, BELÉN | *Formación y funcionalización sostenible de enlaces C=N* |
| **10.** CID, BELÉN / VARGAS, EMILY | *Desarrollo de nuevas transformaciones catalizadas por complejos de boro-piridina* |
| **11.** DE LA TORRE PONCE, GEMA | *Síntesis de ftalocianinas anfífilicas para su aplicación en terapia fotodinámica contra el cáncer* |
| **12.** ADRIO, JAVIER | *Revalorización de biomasa mediante reacciones de cicloadición 1,3-dipolar* |
| **13.** ADRIO, JAVIER | *Síntesis y evaluación de la actividad antimalárica y anti-covid-19 de derivados de 2-carboximetilpirrol* |
| **14.** GONZALEZ RODRIGUEZ, DAVID / LÓPEZ MARTÍN, ISABEL | *Síntesis de un Nanorobot Molecular* |
| **15.** GONZÁLEZ RODRÍGUEZ, DAVID / GONZÁLEZ SÁNCHEZ, MARINA | *Sistemas π-conjugados autoorganizados para células solares orgánicas* |
| **16.** APARICIO HERNÁNDEZ, FÁTIMA / GONZALEZ RODRIGUEZ, DAVID | *Reconocimiento y Encapsulación de ADN en Nanotubos Autoensamblados* |
| **17.** GARCÍA VIADA, ANDRÉS / RODRÍGUEZ GARRIDO, NURIA | *Funcionalización catalítica de enlaces C□H en posiciones remotas de derivados de péptidos* |

| | |
|---|---|
| **18.** ALONSO MONTERO, INÉS / RODRÍGUEZ GARRIDO, NURIA | *Funcionalización directa de enlaces C–H en $\alpha$–aminoácidos. Estudio mecanístico (teórico y experimental)* |
| **19.** FRAILE CARRASCO, ALBERTO | *Desarrollo de nuevos procesos fotocatalíticos usando luz visible* |
| **20.** TORRES CEBADA, TOMÁS | *Síntesis, reactividad y propiedades de subftalocianinas (II): quiralidad, metilación, fotosíntesis artificial y terapia fotodinámica de cáncer y antimicrobial* |
| **21.** RODRÍGUEZ MORGADE, M. SALOMÉ | *Diseño y síntesis de nuevos aceptores tridimensionales basados en subporfirazinas para su aplicación en células solares orgánicas* |
| **22.** MARTÍNEZ DÍAZ, M. VICTORIA | ***S**ubftalocianinas con conjugacion extendida para aplicaciones en células solares* |
| **23.** RIBAGORDA, MARÍA / SIMÓN, SILVIA | *Preparación de sensores de hipoxia basados en azobencenos* |
| **24.** TORTOSA MANZANARES, MARIOLA | *Novel catalytic methods for the selective cleavage of carbon-nitrogen bonds* |
| **25.** TORTOSA MANZANARES, MARIOLA | *Synthesis and reactivity of novel homoallylboration reagents* |
| **26.** ALEMÁN LARA, JOSE / BLANCO FERNÁNDEZ, MATÍAS | *Desarrollo de nuevos procesos carbocatalíticos para la síntesis de Compuestos Biológicamente Activos* |
| **27.** MAULEÓN PÉREZ, PABLO / GÓMEZ ARRAYÁS, RAMÓN | *Desarrollo de procesos multicatalíticos para la difuncionalización de alquinos* |
| **28.** MAULEÓN PÉREZ, PABLO / GÓMEZ ARRAYÁS, RAMÓN | *Nuevas estrategias regio- y estereoselectivas de carbo-borilación de alquinos internos* |

MASTERQO
MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGÁNICA

# PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL 2021-2022 (PROYECTO + TFM)

## I.- DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE

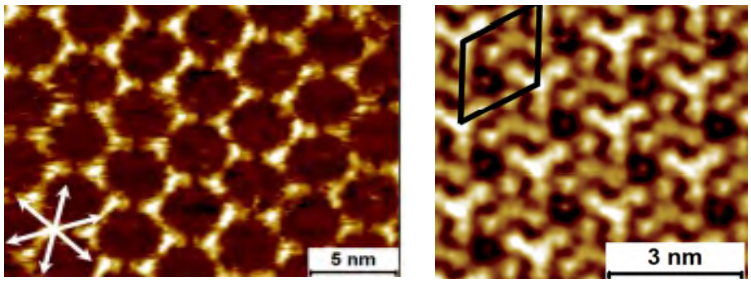

| | | |
|---|---|---|
| **Apellidos y nombre del director/co-director del proyecto:**<br>Hennrich, Gunther, UAM / Enrique Gutierrez-Puebla, ICMM-CSIC | | |
| **Cargo:**<br>Profesor Titular | | |
| **Titulación académica del director:**<br>Doctor | | |
| **Departamento, organismo al que pertenece:**<br>Departamento de Química Orgánica, Universidad Autónoma de Madrid | | |
| Dirección Postal<br>Cantoblanco | | |
| Código Postal<br>28049 | Localidad<br>Madrid | |
| Teléfono directo<br>2775 | Fax<br>3966 | e-mail<br>gunther.hennrich@uam.es |


## II.- DATOS DEL PROYECTO

**Título:** Materiales cristalinos usando enlaces de hidrogeno y halógeno: química supramolecular e ingeniera cristalina.

**Área de conocimiento en que se enmarca:** Química supramolecular, Cristalografía, Ciencia de materiales,

La formación de enlaces no-covalentes entre unidades moleculares orgánicos, tanto enlaces de hidrogeno como de halógeno da lugar a materiales orgánicos supramoleculares.[1] Se estudiará la formación de agregados cristalinos mediante técnicas de XRD,[2] y de NMR e espectroscopia óptica (UV-Vis, fluorescencia, etc.) en disolución como hemos demostrado.[3] Al nivel macroscópico el material 2D se caracteriza con microscopia de tipo STM mostrando su dimensión nanoscópica.




*2D cristales de:*
*Tri(carboxyphenylethynyl)mestitylene, izq.*

*2D Co-cristales de:*
*Tri(4-pyridylethynyl)mesitylene, der.*

*Imágenes de STM de materiales formados por enlaces de hidrógeno y de halógeno.*


**Referencias**: [1] (a) G. Hennrich, S. De Feyter et al. *Chem. Sci.* **2017**, *8*, 3759. (b) G. Hennrich, S. De Feyter et al. *ACS Nano.* **2021**, *submitted.* [2] A. Mukherjee, S. Tothadi, G. R. Desiraju, *Acc. Chem. Res*. **2014**, *47*, 2514. [3] L. Flores, I. López-Duarte, E. Gutierrez-Puebla, G. Hennrich, *Cryst. Eng. Comm.* **2020**, *22*, 416 .


**Capacidades y conocimientos que es recomendable debe tener el alumno/a para la realización de este proyecto**
Crecimiento y estudio de monocristales (XRD); síntesis orgánica avanzada; métodos básicos de química física; conocimiento de conceptos básicos de la ciencia de materiales.

**Dirección del lugar donde se desarrollará el proyecto.**
Laboratorio del Dpto. de Quím. Org. y del ICMM

Fecha: 15/07/2021 Firma del director del proyecto

MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGÁNICA

# PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL 2021-22 (TFM)

## DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE

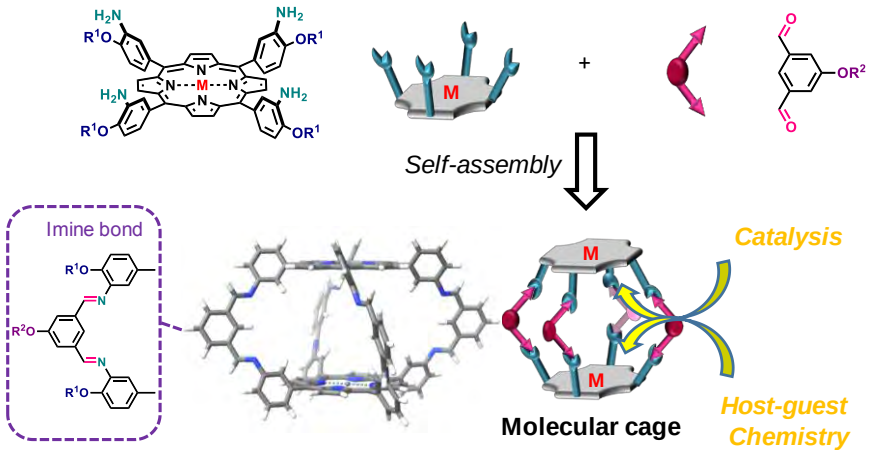

| | |
|---|---|
| **Apellidos y nombre del director(es) del proyecto:** Alberto de Juan Garrudo | |
| **Cargo:** Investigador Postdoctoral "Marie Curie" (MSCA-IF) | |
| **Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto:**<br>Departamento de Química Orgánica, Universidad Autónoma de Madrid<br>Facultad de Ciencias, C/Francisco Tomás y Valiente 7 – Módulo 11, Lab 602. | |
| **Teléfono directo:** 914973778 | **e-mail:** alberto.dejuan@uam.es |


## DATOS DEL PROYECTO

**Título:** Capsulas Moleculares con Propiedades Fotocatalíticas

**Breve descripción de los objetivos, contenido del proyecto y tareas a realizar**

La severa crisis energética debida al consumo masivo de combustibles fósiles y el considerable crecimiento poblacional global, unido al más que evidente impacto ambiental, hacen de extrema urgencia para nuestra sociedad el desarrollo de un conjunto complementario de ***recursos energéticos y materias primas*** sostenibles. En este sentido, la naturaleza representa un modelo brillante de inspiración sobre cómo abordar los problemas de fuentes de energía, residuos y materias primas.




Gran parte de los procesos fotofísicos y catalíticos naturales utilizan complejos enzimáticos donde se integran derivados de **metalo-porfirina** (*clorofilas*, grupos *hemo*, *citocromos*, etc.) en una disposición geométrica perfectamente definida, responsable de su alta actividad y su impresionante regio- y estereoselectividad. Este trabajo se engloba en un proyecto que pretende emular estos modelos enzimáticos y desarrollar sistemas moleculares nanoestructurados dotados de cavidades fotocatalíticas modulables. En concreto, se pretende estudiar procesos de reconocimiento, encapsulación selectiva y (foto)catálisis en el interior de cápsulas autoensambladas, donde dos centros catalíticos de metalo-porfirina se encontrarían enfrentados en una estructura tipo sándwich. El/la alumno/a se encargaría en primer lugar de sintetizar estos macrociclos π-conjugados, dotarlos de información supramolecular a través de enlaces covalentes dinámicos, para que, en combinación con otros ligandos, sean capaces de ensamblarse en las cajas diseñadas. En segundo lugar, se estudiaría el proceso de autoensamblaje y de encapsulación molecular selectiva mediante técnicas espectroscópicas avanzadas (RMN, UV-vis, CD, fluorescencia). Finalmente, se evaluaría el proceso catalítico en función de diversos factores, como el metal empleado, el sustrato, los sustituyentes presentes en el interior de la capsula, así como otras condiciones experimentales.

**Capacidades y conocimientos recomendables que debe tener el estudiante para la realización de este proyecto**

El alumno debe tener conocimientos de Química Orgánica y Determinación Estructural. El alumno debe tener interés por estas materias en general y por su aportación a otras áreas de la Ciencia. Este proyecto está también muy ligado a la asignatura optativa de Nanoquímica. Las asignaturas de Máster de Química Supramolecular y Materiales Moleculares son también importantes en este proyecto, aunque no imprescindibles.

**Indíquese cualquier otra aclaración que se considere que pueda ayudar a los estudiantes en la elección del TFM**

Se trata de un proyecto multidisciplinar aplicado, centrado en la Química Orgánica, pero que engloba distintos conceptos y hace uso de diversas técnicas que el alumno ha aprendido en asignaturas del grado en Química, o aprenderá en el Master en Química Orgánica.

MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGÁNICA

# PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL 2020-21 (TFM)

## DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE

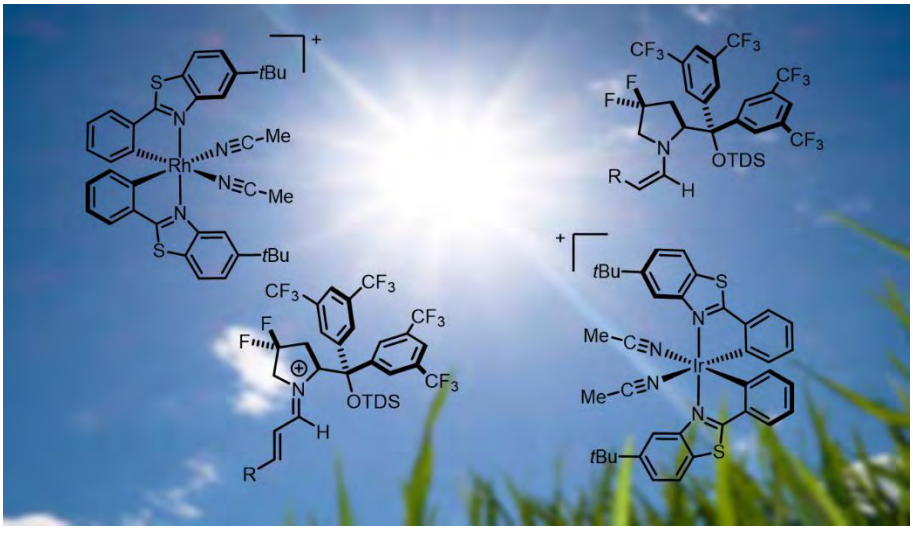

| | |
|---|---|
| **Apellidos y nombre del director(es) del proyecto: Leyre Marzo y Noelia Salaverri** | |
| **Cargo: Contrato atracción de Talento Investigador CAM; Estudiante predoctoral FPU** | |
| **Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto:**<br>Departamento de Química Orgánica | |
| **Teléfono directo: 914975977** | **e-mail: Leyre.marzo@uam.es; noelia.salaverri@uam.es** |

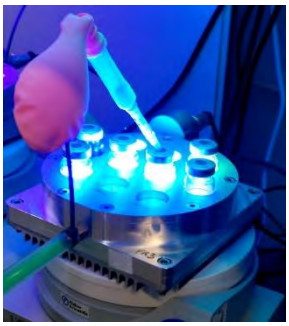

## DATOS DEL PROYECTO

**Título: Nuevas reacciones fotocatalíticas enantioselectivas para la síntesis de compuestos farmacológicamente activos**

**Breve descripción de los objetivos, contenido del proyecto y tareas a realizar**

La fotocatálisis es un área emergente de la síntesis orgánica que emplea la luz cómo fuente de energía para llevar a cabo transformaciones químicas. El empleo de fuentes de energía de bajo coste, la sostenibilidad de los métodos desarrollados y la posibilidad de acceder a transformaciones no viables mediante el empleo de la química convencional, han hecho de la fotocatálisis una de las áreas de investigación más punteras a día de hoy.



En este proyecto se plantea el desarrollo de compuestos biológicamente activos mediante el desarrollo de nuevos procesos fotocatalíticos asimétricos. Para ello se emplearán cómo catalizadores de la reacción (*fotocatalizadores*) compuestos capaces de absorber luz visible (solar, bombillas ó LEDs), generando especies fotoexcitadas que pueden involucrarse en procesos de transferencia de electrones en un entorno quiral. De esta forma se desarrollarán nuevos procesos enantioselectivos radicálicos bajo condiciones muy benignas y sostenibles con el medio ambiente, lo que resulta de gran interés para la industria farmacológica.

Adicionalmente se llevará a cabo el estudio del mecanismo de la reacción desarrollada empleando los distintos equipos analíticos disponibles en el grupo FRONCAT (www.uam.es/jose.aleman), dentro del cual se va desarrollar este proyecto.

**Capacidades y conocimientos recomendables que debe tener el estudiante para la realización de este proyecto**

- Interés por la síntesis orgánica y por las técnicas de separación de compuestos orgánicos.
- Conocimiento de las técnicas de caracterización de compuestos orgánicos.
- Capacidad para comprender textos científicos en inglés y para llevar a cabo búsquedas bibliográficas.

**Indíquese cualquier otra aclaración que se considere que pueda ayudar a los estudiantes en la elección del TFM**

Este proyecto será desarrollado en el grupo de investigación FRONCAT, que cuenta con una amplia experiencia en catálisis. Además, permitirá al estudiante adquirir conocimientos básicos en el manejo de equipos de análisis de las propiedades fotoquímicas como espectrómetro de absorción, diversos fluorímetros que permiten medir tanto fluorescencia en estado estacionario, o fosforescencias a baja temperatura. El grupo cuenta también con un equipo para medir potenciales redox, un SFC-masas, un GC, y dos isoleras para realizar columnas cromatográficas de forma automática.

MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGÁNICA

# PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL 2020-21 (TFM)

## DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE


| | |
|---|---|
| **Apellidos y nombre del director(es) del proyecto:** DE LA ESCOSURA NAVAZO, ANDRÉS / GUISÁN CEINOS, SANTIAGO | |
| **Cargo:** PROFESOR CONTRATADO DOCTOR / INVESTIGADORA POSTDOCTORAL | |
| **Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto:** QUÍMICA ORGÁNICA CAMPUS DE CANTOBLANCO, FACULTAD DE CIENCIAS, MÓDULO 01, 2ª PLANTA, LABORATORIO 203 | |
| **Teléfono directo**<br>2773 | **e-mail**<br>andres.delaescosura@uam.es / santiago.guisan@uam.es |


## DATOS DEL PROYECTO

**Título:** POLIMERIZACIÓN SUPRAMOLECULAR Y AUTOCATÁLISIS CONTROLADA POR LUZ CON DERIVADOS DE AZOBENCENO PORTADORES DE BASES NITROGENADAS

**Breve descripción de los objetivos, contenido del proyecto y tareas a realizar**

La Química de Sistemas centra sus esfuerzos en el estudio de interacciones y reacciones dinámicas, preferiblemente fuera del equilibrio, entre compuestos de redes moleculares complejas, que pueden conducir a sistemas con comportamientos emergentes.[1] Esta moderna disciplina constituye una visión más amplia que el enfoque reduccionista de la química tradicional, la cual se centra normalmente en el aislamiento de compuestos puros y el estudio de sistemas químicos en equilibrio termodinámico. El Grupo de Materiales Biohíbridos y Química de Sistemas (http://syschemdelaescosura.es/), plantea como uno de sus objetivos prioritarios la síntesis híbridos sintéticos con propiedades características de la vida (autoensamblaje adaptativo, replicación, etc.), con estructuras sencillas que contengan componentes procedentes de la biología y componentes funcionales sintetizados en el laboratorio (por ejemplo cromóforos orgánicos).

Uno de los comportamientos característicos de la vida que se pretende emular en sistemas químicos artificiales es la capacidad de autoensamblaje disipativo.[1a,b] Este concepto implica la organización supramolecular de bloques de construcción moleculares en un estado de mayor energía, en contraste con los monómeros desensamblados, que se encuentran en un estado de menor energía (Figura 1A). Esto ocurre a través del suministro constante de energía mediante un combustible o irradiación con luz para la fotoexcitación de un determinado cromóforo. Así, el proceso de autoensamblaje se rige por la distribución de dicho suministro de energía en el tiempo y el espacio, y cualquier estímulo físico o químico externo alterará en última instancia la superficie de energía potencial que rige el proceso de organización supramolecular, pudiendo entonces la estructura resultante evolucionar con el tiempo. Algunas posibles aplicaciones del autoensamblaje disipativo incluyen el desarrollo de materiales autorreparables, adaptativos, sensores, catalizadores, máquinas moleculares y dispositivos para la administración de fármacos.

En este proyecto de TFM se propone la síntesis de derivados de aminoácido portadores de bases nitrogenadas y cromóforos funcionales como el azobenceno (Figura 1B), y el estudio de su polimerización supramolecular y autocatálisis cuando se combinan en medio acuoso. El trabajo propuesto se divide en dos pilares fundamentales: (1) la síntesis orgánica de derivados del aminoácido con azobenceno y bases nitrogenadas, utilizando una metodología en fase sólida y reacciones de formación de enlaces amida; y (2) el estudio de sus cinéticas de reacción con el objetivo de determinar la existencia de procesos de autocatálisis, promovidos por la formación de estructuras supramoleculares que dirigen las interacciones por enlace de hidrógeno y apilamiento pi-pi entre bases nitrogenadas y azobencenos, respectivamente.

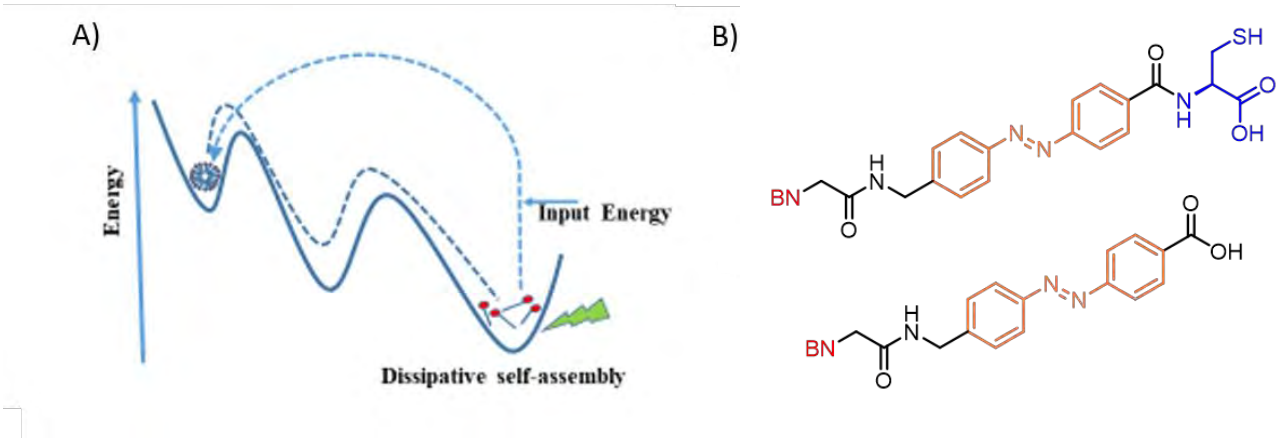



***Figura 1.*** *(A) Representación esquemática de la superficie de energía potencial en un proceso de autoensamblaje disipativo. (B) Estructura de los derivados de azobenzeno con base nitrogenada (BN = timina o adenina, marcada en rojo) y cisteína (marcada en azul) que se sintetizarán durante este proyecto de TFM, para el control con luz de su fotoisomerización, polimerización supramolecular y autocatálisis en medio acuoso.*

Este tipo de investigación tiene importantes implicaciones para el estudio de la química prebiótica y el origen de la vida, así como para la implementación de sistemas vivos artificiales que en el futuro conducirán a nuevos desarrollos los tecnológicos.[2] De hecho, esta propuesta de TFM está enmarcada dentro un proyecto Europeo que dirige el Dr. de la Escosura (FET-OPEN-862081-CLASSY), y que tiene como objetivo simular el modo en que las células controlan sus procesos de auntoensamblaje para aplicación en el ámbito de la síntesis de materiales.

Referencias

[1] (a) E. Mattia, S. Otto, *Nat. Nanotech.* **2015**, *10*, 111; (b) G. Ashkenasy, T. Hermans, S. Otto, A. Taylor, *Chem. Soc. Rev.* **2017**, *46*, 2543. (c) A. de la Escosura, *Life* **2019**, *9*, 66.

[2] (a) K. Ruiz-Mirazo, C. Briones, A. de la Escosura, *Chem. Rev.* **2014**, *114*, 285. (b) k. Ruíz-Mirazo, C. Briones, A. de la Escosura, *Open Biol.* **2017**, *7*, 170050. (c) Morales-Reina *et al.*, *Chem. Eur. J.* **2020**, *26*, 1082-1090.

**Capacidades y conocimientos recomendables que debe tener el estudiante para la realización de este proyecto**

Es recomendable haber cursado las asignaturas de Química Orgánica de 2º, 3er y 4º curso, así como tener ciertos conocimientos de determinación estructural.

**Indíquese cualquier otra aclaración que se considere que pueda ayudar a los estudiantes en la elección del TFM**

El trabajo consistirá principalmente en la síntesis compuestos de derivados de azobenceno portadores de bases nitrogenadas y solubles en medio acuoso, y en el estudio de posibles procesos de fotoisomerización, polimerización supramolecular y autocatálisis, ya sea por sí solos o en mezclas de monómeros. Se trata por tanto de un proyecto de química orgánica, pero con un marcado carácter interdisciplinar, donde el estudiante tendrá ocasión de aprender sobre química sintética, química supramolecular y materiales. Además, el estudiante adquirirá experiencia en distintas técnicas de purificación y caracterización propias de la síntesis orgánica, que incluyen la resonancia magnética nuclear (RMN), la espectrometría de masas, la espectroscopía de UV-Vis y fluorescencia, la microscopía de transmisión electrónica (TEM,) y la cromatografía por HPLC, entre otras.

MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGÁNICA

# PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL 2021-22 (TFM)

## DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE


| | |
|---|---|
| **Apellidos y nombre del director(es) del proyecto:** VELA GALLEGO, SONIA / DE LA ESCOSURA NAVAZO, ANDRÉS | |
| **Cargo:** INVESTIGADORA POSTDOCTORAL / PROFESOR CONTRATADO DOCTOR | |
| **Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto:** QUÍMICA ORGÁNICA, CAMPUS DE CANTOBLANCO, FACULTAD DE CIENCIAS, MÓDULO 01, 4ª PLANTA, LABORATORIO 401 | |
| **Teléfono directo**<br>2773 | **e-mail**<br>sonia.vela@uam.es / andres.delaescosura@uam.es |


## DATOS DEL PROYECTO

**Título:** SÍNTESIS Y AUTOCATÁLISIS DE QUIMERAS MOLECULARES COMPUESTAS POR AMINOÁCIDOS, ÁCIDOS GRASOS Y BASES NITROGENADAS

**Breve descripción de los objetivos, contenido del proyecto y tareas a realizar**

La Química de Sistemas centra sus esfuerzos en el estudio de las interacciones y reacciones dinámicas, preferiblemente fuera del equilibrio, entre compuestos de mezclas químicas complejas, que pueden conducir a sistemas con comportamientos emergentes.[1] Esta moderna disciplina constituye una visión más amplia que el enfoque reduccionista de la química tradicional, la cual se centra normalmente en el aislamiento de compuestos puros y el estudio de sistemas químicos en equilibrio termodinámico.

***Figura 1.*** *Subsistemas básicos que constituyen la vida celular.*

La química de sistemas engloba distintos aspectos de la química supramolecular, de la química combinatoria dinámica y de la investigación sobre el origen de la vida. En relación a este último núcleo de interés, es importante tener en cuenta que aunque no existe una definición general de la vida, sí existe cierto consenso sobre las tres funciones básicas que todo ser vivo presenta, las cuales son: la capacidad de replicación (hacer copias de sí mismo) y transmisión de información genética (que reside por ejemplo en los ácidos nucleicos); la posesión de una maquinaria metabólica que le permita mantenerse alejado del equilibrio (basada en la actividad catalítica de las enzimas); y un compartimento que lo separe del entorno (por ejemplo una membrana).[2] Así pues, la vida celular se concibe como un sistema complejo, fruto de la conjunción dinámica de tres subsistemas con las respectivas propiedades mencionadas anteriormente (Figura 1).

El Grupo de Materiales Biohíbridos y Química de Sistemas (http://syschemdelaescosura.es/), plantea como uno de sus objetivos prioritarios la síntesis de replicadores sintéticos de bajo peso molecular, con estructuras sencillas que contengan componentes procedentes de la biología pero que puedan ser sintetizados en condiciones prebióticas. Estos replicadores sintéticos suelen estar constituidos por algún enlace reversible en su estructura, lo cual confiere un mayor carácter dinámico y adaptativo a este tipo de sistemas. Uno de estos enlaces reversibles es el enlace disulfuro, presente por ejemplo en la cistina. La cistina es el dímero que se obtiene por oxidación de dos moléculas de cisteína. La utilización de la cisteína en este contexto es de gran interés, ya que se trata de un aminoácido muy presente tanto en la biología actual como, probablemente, en las primeras etapas del proceso evolutivo que condujeron desde la química prebiótica hasta el origen de la vida. De hecho, la cisteína está presente en ciertos meteoritos y se obtiene también en experimentos tipo Miller en determinadas condiciones.

Así, en el TFM propuesto nos planteamos los siguientes objetivos (Figura 2):

(1) Síntesis orgánica de derivados del aminoácido cisteína, portadores de una determinada base nitrogenada (por ejemplo, citosina, **1C**) o un ácido graso (por ejemplo, ácido oleico, **1O**). Para ello se utilizará una metodología basada en la síntesis en fase sólida.

(2) Oxidación del grupo tiol de la cisteína en los derivados sintetizados, con la finalidad de crear un enlace disulfuro, cuya reversibilidad en reacciones de intercambio tiol/disulfuro es conocida.

(3) Evaluar la cinética de formación de los compuestos oxidados a distintos valores de pH, con el objetivo de determinar si en algún caso conducen a procesos de replicación, por autocatálisis física, debida al autoensamblaje de estructuras supramoleculares que dirigen las interacciones por enlace de hidrogeno y apilamiento π-π entre bases, más efectos hidrófobos en el caso de incorporar una cadena de oleico.

(4) Obtención de una biblioteca dinámica dirigida por la formación de enlaces disulfuro reversibles y procesos de organización supramolecular en mezclas de los derivados **1C** y **1O**.

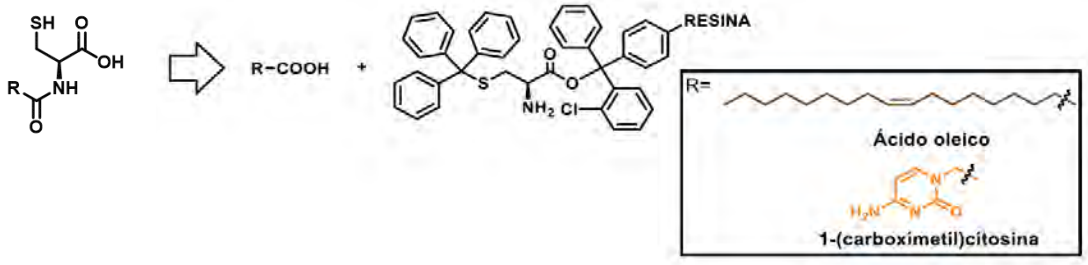



***Figura 2.*** *Análisis retrosintético para la obtención de los derivados **1C** y **1O**, que servirán como monómeros para el resto de estudios supramoleculares y cinéticos del TFM propuesto.*

Este tipo de investigación tiene importantes implicaciones para el estudio de la química prebiótica y el origen de la vida, así como para la implementación de células sintéticas que en el futuro conducirán a nuevos desarrollos tecnológicos. De hecho, esta propuesta de TFM está enmarcada dentro un proyecto Europeo que dirige el Dr. de la Escosura (FET-OPEN-862081-CLASSY), y que tiene como objetivo simular el modo en que las células controlan sus procesos con fines sintéticos, para lo cual es necesario dirigirlos mediante mecanismos que regulan su replicación y actividad catalítica.

Referencias

[1] (a) E. Mattia, S. Otto, *Nat. Nanotech.* **2015**, *10*, 111; (b) G. Ashkenasy, T. Hermans, S. Otto, A. Taylor, *Chem. Soc. Rev.* **2017**, *46*, 2543. (c) A. de la Escosura, *Life* **2019**, *9*, 66.

[2] (a) K. Ruiz-Mirazo, C. Briones, A. de la Escosura, *Chem. Rev.* **2014**, *114*, 285. (b) k. Ruíz-Mirazo, C. Briones, A. de la Escosura, *Open Biol.* **2017**, *7*, 170050. (c) Morales-Reina *et al.*, *Chem. Eur. J.* **2020**, *26*, 1082-1090.

**Capacidades y conocimientos recomendables que debe tener el estudiante para la realización de este proyecto**

Es recomendable haber cursado las asignaturas de Química Orgánica de 2º, 3er y 4º curso, así como tener ciertos conocimientos de determinación estructural.

**Indíquese cualquier otra aclaración que se considere que pueda ayudar a los estudiantes en la elección del TFM**

El trabajo consistirá principalmente en la síntesis compuestos de derivados de cisteína portadores de bases nitrogenadas y grupos funcionales adecuados, y en el estudio de posibles procesos de autocatálisis que emerjan a partir de su oxidación en medio acuoso, ya sea por sí solos o en mezclas de monómeros. Se trata por tanto de un proyecto de química orgánica, pero con un marcado carácter interdisciplinar, donde el estudiante tendrá ocasión de aprender sobre química sintética, química supramolecular y sistemas biohíbridos. Además, el estudiante adquirirá experiencia en distintas técnicas de purificación y caracterización, como la resonancia magnética nuclear (RMN), la espectrometría de masas, la espectroscopía de UV-Vis y fluorescencia, la microscopía de transmisión electrónica (TEM,) y la cromatografía por HPLC, entre otras.

MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGÁNICA

# PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL 2021-22 (TFM)

## DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE


| | |
|---|---|
| **Apellidos y nombre del director(es) del proyecto:**<br>Jose A. Fernández Salas | |
| **Cargo:**<br>Contratado Ramón y Cajal | |
| **Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto:**<br>DEPARTAMENTO QUÍMICA ORGÁNICA, FACULTAD DE CIENCIAS, UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE MADRID. Dirección postal: Ciudad Universitaria de Cantoblanco, Calle Francisco Tomás y Valiente, 7, 28049 Madrid | |
| **Teléfono directo:** 914975977 | **e-mail:** j.fernandez@uam.es |


## DATOS DEL PROYECTO

**Título:** Desarrollo de nuevas metodologías electroquímicas para la formación de enlaces carbono-carbono

**Breve descripción de los objetivos, contenido del proyecto y tareas a realizar**

Durante la última década, la electroquímica ha experimentado un renovado interés por parte de la comunidad científica, destacando en particular la electroquímica aplicada a la síntesis orgánica (electro-orgánica). La electroquímica presenta una variedad de importantes beneficios, ofreciendo condiciones de reacción muy suaves y métodos eficientes para llevar a cabo oxidaciones o reducciones, que además se pueden lograr de manera selectiva y precisa utilizando electrones como reactivos aplicando una corriente eléctrica. Por tanto, la electroquímica evita el uso de cantidades estequiométricas de reactivos oxidantes y reductores a menudo tóxicos y poco selectivos. Además de estas importantes mejoras en materia de sostenibilidad, química verde y huella ecológica, la electroquímica ofrece nuevas reactividades, inalcanzables con sistemas redox más tradicionales.

Así, uno de los objetivos de este proyecto será el desarrollo de nuevos procesos electroquímicos como implementación de otras metodologías catalíticas (principalmente fotocatálisis o catálisis de níquel) orientado a la síntesis de compuestos potencialmente bioactivos de una forma más segura, eficaz y responsable con el medio ambiente, incluyendo metodologías enantioselectivas. Estos sistemas implicarán la reducción catódica de precursores de radicales fácilmente disponibles (haluros de alquilo, bencilo y alilo) para la construcción enantioselectiva de enlaces carbono-carbono realizada en una célula no dividida en busca de métodos nuevos y sostenibles utilizando aceptores de Michael o sistemas heterocíclicos (reacción de Minisci) como plantillas.

Este TFM tiene además planteado como objetivo el estudio detallado del mecanismo de reacción, lo que proveerá al alumno de nuevas capacidades y conocimientos en el área de la Química Orgánica (incluyendo electro-orgánica), Determinación Estructural y Catálisis.

Asimismo, se incrementará su experiencia tanto en el trabajo experimental del laboratorio (manejo de material, montajes de reacciones complejas, nuevas técnicas de purificación y caracterización de compuestos, etc) como en el planteamiento de posibles mecanismos de reacción, búsquedas bibliográficas y exposición y escritura de trabajos científicos.

Para más información en las líneas de investigación de nuestro grupo, véase: www.uam.es/jose.aleman

**Capacidades y conocimientos recomendables que debe tener el estudiante para la realización de este proyecto**

Recomendable haber cursado las asignaturas de Ampliación de Química Orgánica (3er curso), Determinación Estructural (4º curso) y haber realizado el TFG en Química Orgánica.

**Indíquese cualquier otra aclaración que se considere que pueda ayudar a los estudiantes en la elección del TFM**

El alumno podrá compatibilizar el desarrollo del proyecto con el curso normal del resto de las asignaturas en que se encuentre matriculado en el Máster.

Fecha: 14-07-2021

Firma de los directores del proyecto:

Jose A. Fernández Salas

MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGÁNICA

# PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2021-2022

## DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE

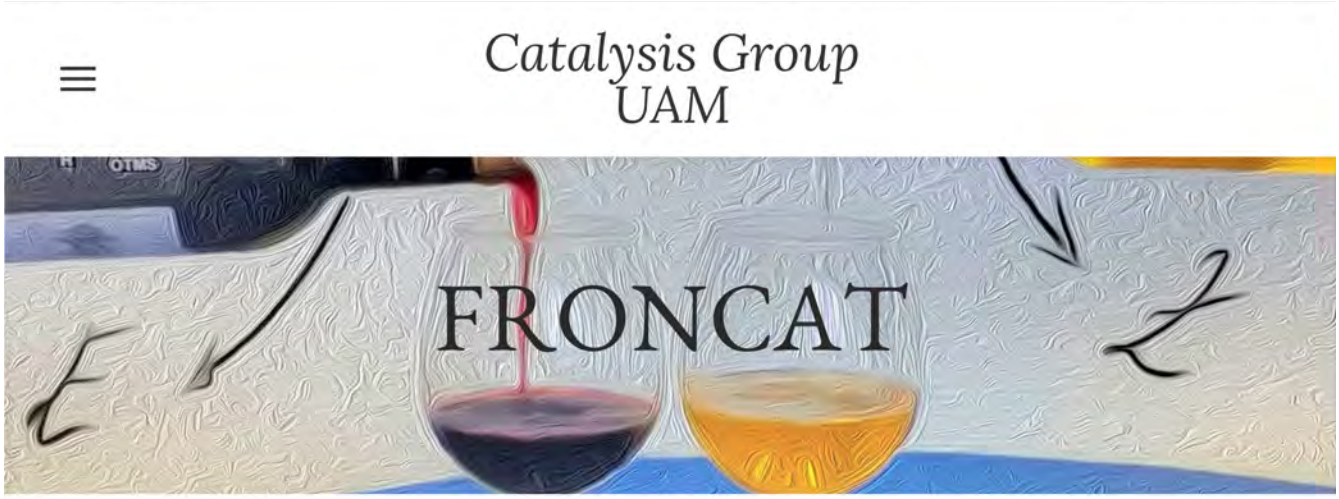

| | |
|---|---|
| **Apellidos y nombre del director(es) del proyecto:**<br>Vanesa Marcos Algaba | |
| **Cargo:**<br>Contratado Ramón y Cajal | |
| **Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto:**<br>Departamento de Química Orgánica | |
| **Teléfono directo** | **e-mail**<br>Vanesa.marcos@uam.es |


## DATOS DEL PROYECTO

**Título: Development of Smart Material for photocatalysis (Desarrollo de Materiales Inteligentes para Fotocatálisis)**

**Breve descripción de los objetivos, contenido del proyecto y tareas a realizar**

El presente proyecto se centra en el desarrollo de catalizadores inteligentes basados en materiales tipo COF, permitiendo así un completo control sobre la cinética, la quimio-, estero- y regioselectividad de procesos fotocataliticos. En estos procesos, dichos catalizadores se activaran y desactivaran de manera ortogonal mediante la aplicación de distintos estímulos, tales como irradiación con luz o cambios de pH, permitiendo un total control del orden en el que las reacciones químicas sucedan en "piscinas" de reactivos, sin interferir unos con otros. Posteriormente se aplicarán a la síntesis de distintas moléculas con interés farmacológico, como son antitumorales, o antivirales. Para más información en las líneas de investigación de nuestro grupo, véase: **www.uam.es/jose.aleman**




Du**rante la realización del proyecto el alumno realizará las siguiente tareas:** a) Desarrollo de estrategias encaminadas a realizar con éxito búsquedas bibliográficas vinculadas con la Química Orgánica con objeto de obtener la información necesaria para abordar el proyecto de investigación; b) manejo del material del laboratorio y experiencia en eliminación de residuos; c) técnicas de purificación de compuestos orgánicos (fundamentalmente técnicas cromatográficas de distinto grado de complejidad; d) caracterización y elucidación estructural de compuestos orgánicos a partir de sus datos físicos y espectroscópicos; e) racionalización de resultados y planteamientos mecanísticos.

**Capacidades y conocimientos recomendables que debe tener el estudiante para la realización de este proyecto**

Se recomienda al estudiante tener conocimientos tanto de Química orgánica como Inorgánica.

**Indíquese cualquier otra aclaración que se considere que pueda ayudar a los estudiantes en la elección del TFM**

Al tratarse de un proyecto multidisciplinar durante la realización del proyecto el estudiante adquirirá amplios conocimientos en diversas areas de química.

MASTERQO
MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGÁNICA

# PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2021-2022

## DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE


| | |
|---|---|
| **Apellidos y nombre del director(es) del proyecto: Bottari Giovanni y Fernández Vera Óscar** | |
| **Cargo: Profesor Contratado Doctor (Bottari Giovanni) y becario FPU (Fernández Vera Óscar)** | |
| **Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto: Departamento de Química Orgánica, Facultad de Ciencias, Universidad Autónoma de Madrid, Cantoblanco, 28049 Madrid** | |
| **Teléfono directo. 914972777** | **e-mail: giovanni.bottari@uam.es** |

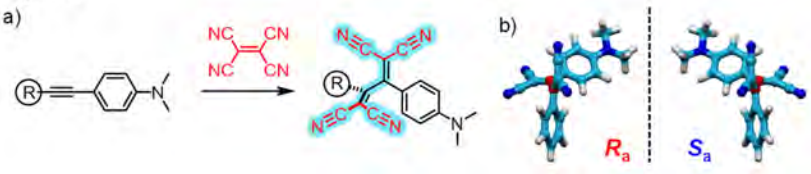

## DATOS DEL PROYECTO

**Título: Ampliando la química del tetracianobuta-1,3-dieno (TCBD): Síntesis y estudio de nuevos derivados de TCBD fusionados a grupos antrilos**

**Breve descripción de los objetivos, contenido del proyecto y tareas a realizar:**

**Introducción:** La preparación y el estudio de sistemas dadores-aceptores de electrones (D-A) representa un tema de investigación de gran importancia con implicaciones directas en campos tecnológicamente relevantes como la conversión de luz en energía y la electrónica molecular.[1] En este sentido, mientras que el abanico de unidades dadoras de electrones es amplio y en continuo crecimiento, el de los aceptores de electrones es considerablemente más limitado con fullerenos, perilendiimidas y fragmentos multiciano entre los bloques de construcción más investigados.

Figura 1



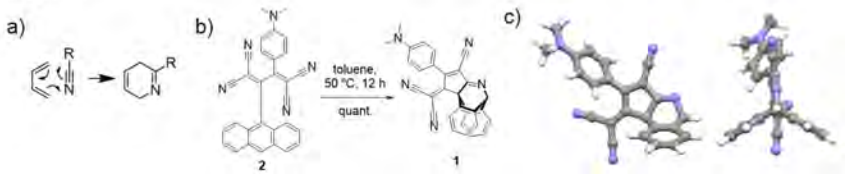

Dentro de este último apartado, el tetracianobuta-1,3-dieno (TCBD) se ha postulado como una unidad muy interesante para la preparación de conjugados de tipo "push-pull".[2] El TCBD es un buen aceptor de electrones que se puede introducir fácilmente y con altos rendimientos en derivados que contienen alquinos activados a través de una reacción de cicloadición-retroelectrociclización con tetracianoetileno (Figura 1a).[2] Como consecuencia, se han descrito numerosos sistemas D-A basados en TCBD en los que este grupo se ha unido a unidades electroactivas como fullerenos,[3] (sub)porfirinas,[4] y (sub)ftalocianinas,[5] por mencionar algunos. Además de su excelente capacidad como aceptor de electrones, el TCBD posee una característica estructural peculiar resultante de la disposición casi-ortogonal de sus dos mitades de dicianovinileno y a la rotación restringida alrededor del enlace C-C que los conecta, dando lugar, en algunos casos, a la formación de atropisómeros (Figura 1b). Estas especies, en algunas condiciones experimentales, se han podido, incluso, llegar a aislarse. De todas maneras, si bien muchos sean los estudios sobre la unidad de TCBD, en muy pocos casos se han descrito transformaciones químicas de esta unidad en derivados multiciano altamente funcionalizados a través de reacciones de reordenamiento intra- o intermolecular.[2]

La reacción aza-Diels-Alder (ADA) es una cicloadición [4+2] entre un dieno y un dienófilo que contiene un átomo de nitrógeno en uno o ambos reactivos, lo que da lugar a heterociclos nitrogenados e insaturados de seis miembros.[6] En la literatura se han descrito muchos ejemplos de reacciones de Diels-Alder "clásicas" (en las cuales los átomos del dieno y del dienófilo involucrados en la cicloadicción son átomos de carbono), mientras que son escasos los trabajos sobre reacciones de tipo ADA, e incluso más escasos los basados en ciano-Diels-Alder (CDA), un tipo de reacción ADA en la que el nitrilo actúa como dienófilo (Figura 2a). La alta estabilidad térmica y energía de disociación del triple enlace C-N hacen que el nitrilo sea un dienófilo extremadamente pobre para las reacciones de cicloadiciones. Para solventar, si bien parcialmente, estas limitaciones, se han explorado distintas estrategias como i) incrementar el carácter dienófilo del nitrilo mediante la incorporación, en su proximidad, de grupos aceptores de electrones y/o ii) llevar a cabo reacciones intramoleculares entropicamente favorables. Además, a menudo se requieren altas temperaturas para activar las reacciones de CDA, algo que también favorece el proceso de retro-CDA, convirtiendo así,

parcialmente, el producto en los reactivos iniciales. Por lo tanto, los aductos de CDA suelen estabilizarse, generalmente, a través de la complejación con especies externas, para así desplazar el equilibrio de la reacción hacia los productos.

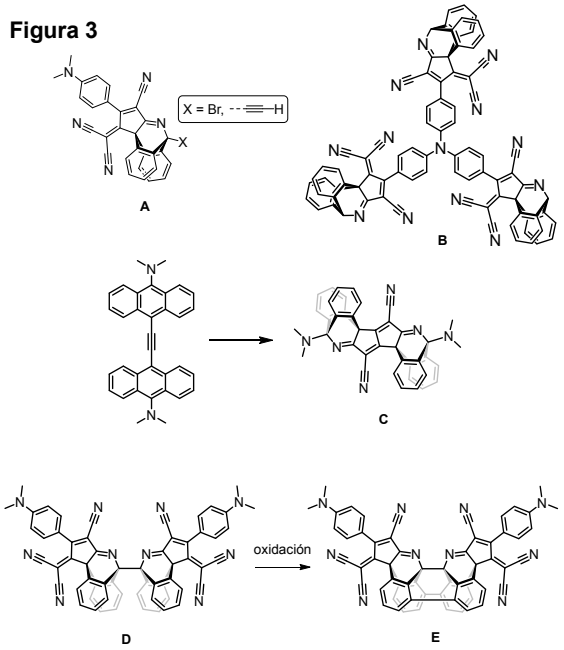
Como parte de nuestro interés en los derivados de TCBD y con el objetivo de ampliar la limitada "caja de herramientas" de las reacciones de transformación de TCBD, recientemente hemos decidido expandir el espacio químico de esta unidad electroactiva explorando su posible utilización en reacciones de tipo CDA.[7] Nos planteamos que la unidad de TCBD con sus múltiples grupos cianos podría actuar como una plataforma ideal para reacciones de CDA si implementada correctamente dentro de estructuras moleculares adecuadas. Con el fin de validar esta hipótesis hemos preparado un derivado de TCBD donde esta unidad se ha unido a la posición 9 de un grupo antrilo (**2** en Figura 2b). En condiciones térmicas suaves, este compuesto se transforma de manera cuantitativa en un nuevo derivado (**1** en Figura 2b) resultante de una reacción de CDA intramolecular entre el resto antrilo (actuando como dieno) y uno de los cuatro nitrilos del TCBD (actuando como dienófilo). Dicho producto de CDA, cuya estructura bicíclica se ha determinado de forma inequívoca mediante análisis de difracción de rayos X (Figura 2c), ha demostrado una alta estabilidad térmica, interesantes características ópticas tanto en el estado fundamental como en el excitado, así como una excelente capacidad como aceptor de electrones.[7]

**Figura 2**




**Objetivos:** El objetivo general de este trabajo de Máster es explorar la potencialidad de la reacción de CDA intramolecular entre los grupos TCBD y antrilo hacia la preparación y estudio de sistemas optoelectrónicos mejorados. Con este fin se pretende preparar análogos de **1** i) funcionalizados con átomos de bromo o grupos etinilos para su posterior conjugación con unidades dadoras de electrones a través de reacciones catalizadas por metales de transición (**A** en Figura 3), y ii) decorando las posiciones periféricas de una unidad de trifenilamina, un excelente grupo dador de electrones (**B** en Figura 3). En este ultimo caso, además del estudio de sus propiedades optoelectrónicas, la capacidad de complejación de este derivado trisustituido en disolución hacia el fullereno $C_{60}$ será investigada. De la misma manera se pretende llevar a cabo el estudio de dobles reacciones intramoleculares de CDA utilizando precursores portadores de dos unidades de antrilo (**C** en Figura 3), obteniendo así sistemas que combinen interesantes propiedades optoelectrónicas con una estructura tridimensional peculiar. Por último, se pretende preparar un sistema que contenga en su estructura dos unidades de TCBD-antrilo fusionado (**D** en Figura 3). Es de esperar que la presencia de múltiples átomos de nitrógeno (de tipo ciano e imina) puedan favorecer la complejación de iones metálicos. Sobre este ultimo sistema se llevará a cabo una reacción de oxidación con el fin de "fusionar" las dos unidades de antrilo dando así lugar a un sistema altamente conjugado que es de esperar presente interesantes propiedades fisicoquímicas (**E** en Figura 3).

**Figura 3**




**Referencias:**


1. a) L. Hammarström, *Acc. Chem. Res.* **2015**, *48*, 840; b) S. Fukuzumi, K. Ohkubo, T. Suenobu, *Acc. Chem. Res.* **2014**, *47*, 1455.
2. T. Michinobu, F. Diederich, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2017**, *57*, 3552.
3. M. Yamada, P. Rivera-Fuentes, W. B. Schweizer, F. Diederich, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2010**, *49*, 3532.
4. a) F. Diederich y colaboradores, *Chem. Eur. J.* **2017**, *23*, 6357; b) G. Bottari y colaboradores, *J. Am. Chem. Soc.* **2020**, *142*, 7920.
5. a) G. Bottari y colaboradores, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2016**, *55*, 5560; b) G. Bottari y colaboradores, *J. Am. Chem. Soc.* **2017**, *139*, 5520; c) G. Bottari y colaboradores, *Chem. Sci.* **2019**, *10*, 10997; d) G. Bottari y colaboradores, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2020**, *59*, 21224;
6. a) M. S. Manas, P. Dipak, *Curr. Org. Chem.* **2014**, *18*, 1586; b) M.-H. Cao, N. J. Green, S.-Z. Xu, *Org. Biomol. Chem.* **2017**, *15*, 3105.
7. Articulo en preparación.


**Capacidades y conocimientos recomendables que debe tener el estudiante para la realización de este proyecto**

Se requiere un(a) estudiante motivado(a) con buenos conocimientos de química orgánica sintética y elucidación estructural, e interés por áreas interdisciplinares relacionadas con la nanociencia.

**Indíquese cualquier otra aclaración que se considere que pueda ayudar a los estudiantes en la elección del TFM**

Se pretende que este proyecto de Máster sea la base para la realización de una Tesis Doctoral en el grupo de Nanociencia y Materiales Moleculares de la UAM, por lo tanto, se requieren estudiantes con buen expediente académico.

MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGÁNICA

# PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL 2021-22 (TFM)

## DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE


| | |
|---|---|
| **Apellidos y nombre del director(es) del proyecto:** Belén Cid | |
| **Cargo:** Profesora titular | |
| **Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto:**<br>Laboratorio 401, Departamento de Química Orgánica<br>C/ Francisco Tomás y Valiente 7, Ciudad Universitaria de Cantoblanco, Madrid 28049 | |
| **Teléfonos directos:** 914975505 | **e-mail:** belen.cid@uam.es |


## DATOS DEL PROYECTO

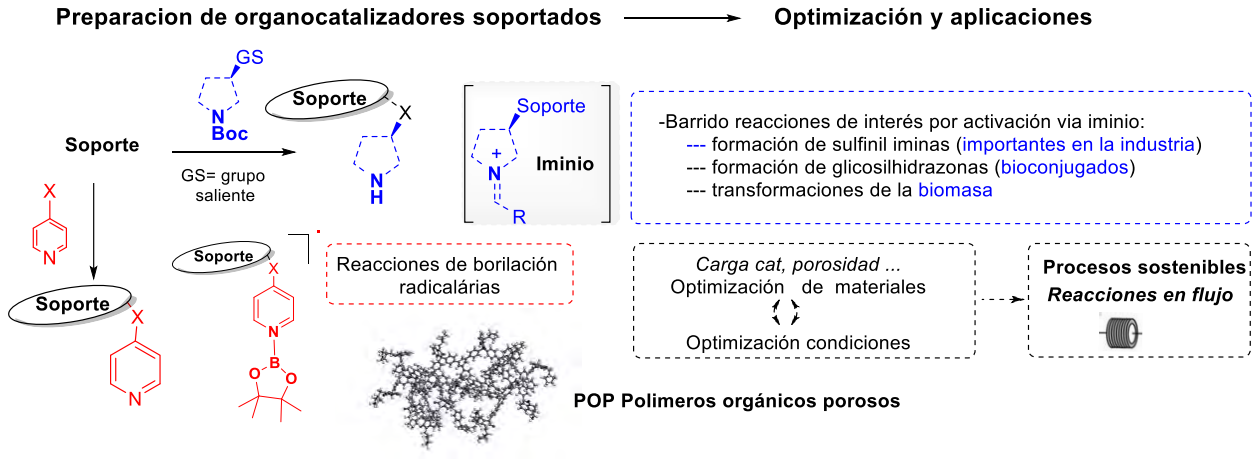
**Título: Formación y funcionalización sostenible de enlaces C=N.**

**Breve descripción de los objetivos, contenido del proyecto y tareas a realizar**

Debido fundamentalmente a que multitud de compuestos con actividad biológica contienen grupos nitrogenados en sus estructuras, su obtención selectiva y eficaz posee gran interés. Los principios de la química verde cada vez se tienen más presentes a la hora de desarrollar nuevos métodos de síntesis. En este sentido, el uso de catalizadores heterogéneos juega un papel importante ya que éstos presentan una serie de ventajas frente a los catalizadores homogéneos tradicionales tales como su fácil separación del medio de reacción, la posibilidad de reciclarlos, su fácil manejo y menor toxicidad.

Nuestro interés se centra en el desarrollo de métodos sostenibles que permitan la formación de enlaces C=N así como su funcionalización. Uno de nuestros puntos de interés es el uso de catalizadores con soportes que además de poseer la ventaja intrínseca de cualquier catalizador heterogéneo proporcionen un aumento de la capacidad catalítica del catalizador soportado. Concretamente, estamos estudiando soportes poliméricos de diseño.

Trabajamos con el ICTP (CSIC) en el desarrollo de **polímeros** robustos que modulan la actividad catalítica de organocatalizadores anclados. De este modo, podemos hacer transformaciones que el catalizador sin anclar no es capaz de realizar y llevar a cabo reacciones en flujo, con las ventajas a nivel industrial que ello supone. Nuestros estudios se han centrado en la **preparación de bioconjugados, transformaciones de la biomasa y formación de enlaces C-C y C-N de manera sostenible para su aplicación en el futuro en química de flujo**. En este trabajo nos centraremos en el uso de polímeros de poliestireno y de tipo POP (redes de polímeros orgánicos porosos). Estos últimos son robustos materiales, altamente porosos que poseen excelentes propiedades catalíticas para química confinada y pueden resultar especialmente útiles en química de flujo. No obstante, aunque la catálisis en espacios confinados se ha empleado en catálisis metálica, su uso como soporte de organocatalizadores es muy limitado,[1] con lo que su investigación ofrecería interesantes novedades. Con el objetivo de desarrollar procesos sostenibles, centraremos nuestro estudio en el desarrollo de catalizadores heterogéneos con unidades de pirrolidina ancladas y realizaremos un estudio de posibles aplicaciones mediante activación *via* iminio, área en la que tenemos amplia experiencia[2] (Esquema 1, en azul).




**Esquema 2**

Adicionalmente, estudiaremos reacciones de formación de **enlace C-B mediante procesos radicálarios** a partir de iminas o nitronas usando polímeros de estructura porosa similar que posean piridina soportada (Esquema 2 en rojo).[3]

1.- a) Gramage-Doria, R.; Reek, J. N. H. "*Organocatalysis in Confined Spaces*" *ChemCatChem* **2013**, *5*, 677.
2.- a) Duce, S.; Alonso, I.; Lamsabhi, A. M.; Rodrigo, E.; Morales, S.; García Ruano, J.L.; Poveda, A.; Mauleón, P. and Cid M.B. *ACS Catal*, **2018**, *8*, 22-34 y referencias allí citadas. b) Morales, S.; Guijarro, F. G.; García Ruano, J. L.; Cid, M. B. *J. Am. Chem. Soc.* **2014**, *136*, 1082−1089. c) Morales, S.; Guijarro, F. G.; Alonso, I.; García Ruano, J. L.; Cid, M. B. *ACS Catal.* **2016**, *6*, 84−91. d) Morales, S.; Aceña, J.L.; García Ruano, J. L.; Cid, M. B. *J. Org. Chem.* **2016**, *81*, 10016-10022.
3.- Zhang, L; Jiao, L. *J. Am. Chem. Soc.* **2019**, *141*, 9124-8.

**Capacidades y conocimientos recomendables que debe tener el estudiante para la realización de este proyecto:**

**Indíquese cualquier otra aclaración que se considere que pueda ayudar a los estudiantes en la elección del TFM**

Es importante destacar que se pretende potenciar el **aprendizaje autónomo** del estudiante y prepararlo para la resolución de problemas en un fututo puesto laboral. Aunque se explorarán reacciones nuevas el estudiante dispondrá de información y ayuda suficiente para que este pequeño ejercicio de investigación sea asequible a su nivel.

Adicionalmente, se familiarizará con las técnicas básicas de síntesis y caracterización de materiales y de compuestos orgánicos y con el modo habitual de trabajo de un laboratorio de investigación: búsqueda de información, propuesta de soluciones al problema planteado, análisis y discusión de resultados intentando fomentar su capacidad de trabajo en equipo.

# PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL 2021-22 (TFM)

## DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE


| | |
|---|---|
| **Apellidos y nombre del director(es) del proyecto:** Belén Cid y Emily Vargas | |
| **Cargo:** Profesora titular | |
| **Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto:**<br>Laboratorio 401, Departamento de Química Orgánica<br>C/ Francisco Tomás y Valiente 7, Ciudad Universitaria de Cantoblanco, Madrid 28049 | |
| **Teléfonos directos:** 914975505, | **e-mail:** belen.cid@uam.es |

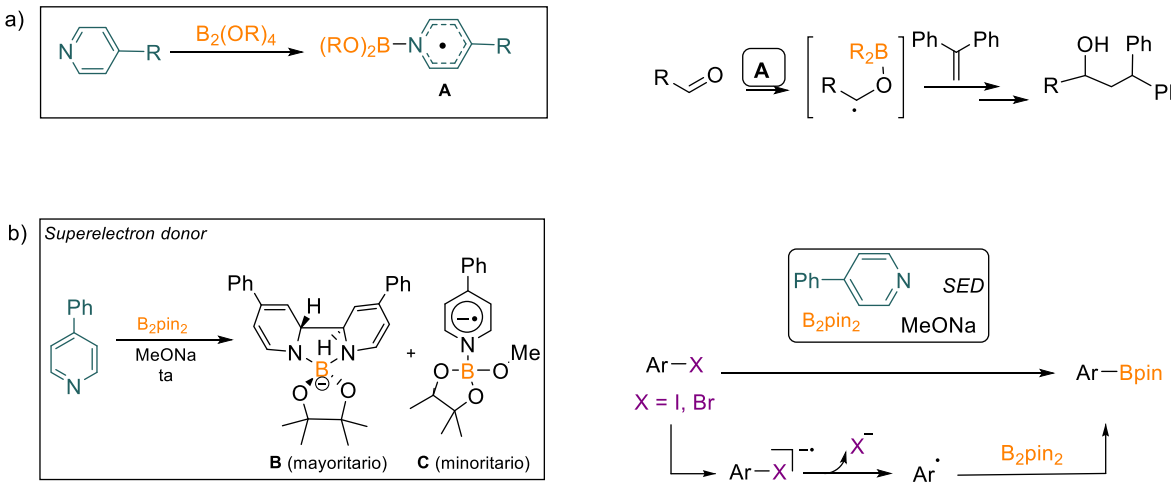

## DATOS DEL PROYECTO

**Título:** ***Desarrollo de nuevas transformaciones catalizadas por complejos de boro-piridina***.

**Breve descripción de los objetivos, contenido del proyecto y tareas a realizar**

La ruptura de enlaces B–B utilizando piridinas funcionalizadas es un tema de investigación muy reciente que ha suscitado gran interés por la variedad de procesos que promueve bajo condiciones suaves y en ausencia de metales de transición.[1]

Dentro de esta línea, caben destacar los complejos radicálicos de boro-piridina (**A**) que son capaces de catalizar reacciones de borilación o de acoplamientos C-C como el representado en el esquema 1a. Por otro lado, un profundo estudio mecanístico demostró que $B_2pin_2$ y un derivado de piridina en presencia de metóxido evolucionaba a la formación de las especies **B** y **C** que pueden actuar como *Super Electron Donors* (SED). En condiciones suaves, el SED es capaz de transformar un derivado halogenado en un anión radical que evoluciona a un radical arilo y que a su vez reacciona con $B_2pin_2$ para proporcionar el derivado borilado (Esquema 1b).[1]

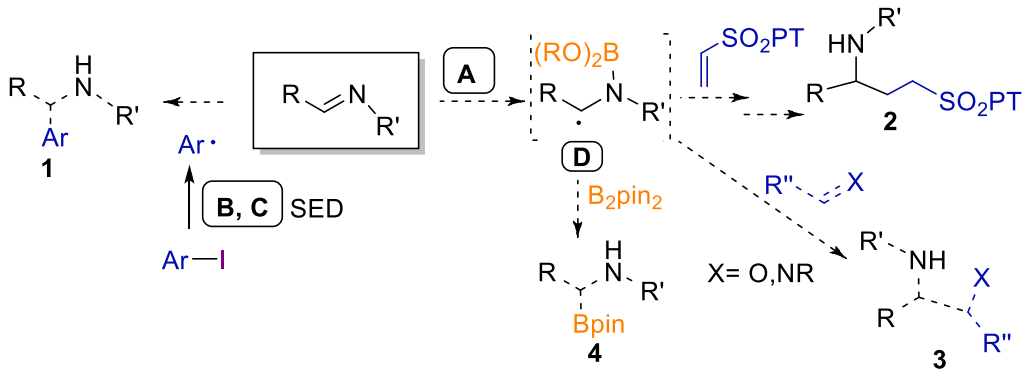



**Esquema 1**. Transformaciones catalizadas por complejos de boro-piridina

En nuestro laboratorio hemos ampliado la utilidad de los complejos de tipo B y C en la formación de enlaces C-S.[2]

Dado el interés que tiene el desarrollo de métodos para la preparación selectiva de compuestos nitrogenados, en este momento estamos analizando las posibilidades que ofrecen complejos de boro-piridina en la funcionalización de enlaces C=N (Esquema 2). Los estudios preliminares realizados en esta transformación han proporcionado resultados muy prometedores.

Un ejemplo de aplicación de los SED (intermedios **B** y **C**), se recoge en el esquema 2 e implica la adición de especies radicálicas sobre el enlace C=N que proporcionarían estructuras de tipo **1**. Por otro lado, el tratamiento con complejos radicálicos de boro-piridina (**A**) podría generar intermedios radicálicos α-amino (**D**) que ofrecen multitud de posibilidades de reacción como las representadas en el esquema 2. Estas transformaciones implican un umpolung en el C contiguo al N y no son fácilmente accesibles por otras vías (compuestos **2-4**). Cabe destacar el interés de preparación de los ácidos α-aminoborónicos (**4**). Éstos son farmacóforos clave en la inhibición de proteasas y como consecuencia existen en el mercado varios fármacos que incluyen esta agrupación en su estructura como Bortezomib.




**Esquema 2**. Estudio de reactividad de sustratos con enlace C=N y complejos de boro-piridina

Nuestro último fin consiste en la introducción asimétrica de estos sustituyentes, para ello se estudiarán diferentes aproximaciones entre las que se encuentra el uso de derivados diboro quirales.


1.- Misal Castro, L.; Sultan, I.; Tsurugi, H.; Mashima, K. *Pyridine-Mediated B–B Bond Activation of $(RO)_2B–B(OR)_2$ for Generating Borylpyridine Anions and Pyridine-Stabilized Boryl Radicals as Useful Boryl Reagents in Organic Synthesis*. *Synthesis* **2021** (DOI 10.1055/a-1486-8169).

2.- Franco, M.; Vargas, E. L., Tortosa, M.; Cid, M. B. *Coupling of Thiols and Aromatic Halides Promoted by Diboron Derived Super Electron Donors.* Enviado a *Chem. Comm*. para su publicación.


**Capacidades y conocimientos recomendables que debe tener el estudiante para la realización de este proyecto:**

**Indíquese cualquier otra aclaración que se considere que pueda ayudar a los estudiantes en la elección del TFM**

Es importante destacar que se pretende potenciar el **aprendizaje autónomo** del estudiante y prepararlo para la resolución de problemas en un fututo puesto laboral. Aunque se explorarán reacciones nuevas el estudiante dispondrá de información y ayuda suficiente para que este pequeño ejercicio de investigación sea asequible a su nivel.

Adicionalmente, se familiarizará con las técnicas básicas de síntesis orgánica haciendo hincapié en su versión asimétrica y caracterización de compuestos orgánicos y con el modo habitual de trabajo de un laboratorio de investigación: búsqueda de información, propuesta de soluciones al problema planteado, análisis y discusión de resultados intentando fomentar su capacidad de trabajo en equipo.

MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGÁNICA

# PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL 2021-22 (TFM)

## DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE


| | |
|---|---|
| **Apellidos y nombre del director(es) del proyecto: DE LA TORRE PONCE, GEMA;** | |
| **Cargo: PROFESOR TITULAR** | |
| **Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto: DEPARTAMENTO DE QUIMICA ORGANICA, FACULTAD DE CIENCIAS, C/FRANCISO TOMÁS Y VALIENTE 7, CANTOBLANCO 28049, MADRID** | |
| **Teléfono directo: 914974710** | **e-mail: gema.delatorre@uam.es** |


## DATOS DEL PROYECTO

**Título: SINTESIS DE FTALOCIANINAS ANFÍFILICAS PARA SU APLICACIÓN EN TERAPIA FOTODINÁMICA CONTRA EL CÁNCER**

**Breve descripción de los objetivos, contenido del proyecto y tareas a realizar**

La **terapia fotodinámica (PDT)**, es un método terapéutico en el que la combinación de un **fotosensibilizador (PS)** no tóxico, con luz visible y oxígeno, es capaz de producir especies reactivas de oxígeno citotóxicas, las cuales pueden matar células malignas por inducción de apoptosis o necrosis. Esta terapia es una herramienta médica aprobada para el tratamiento de patologías tanto oncológicas como de otras tipologías y puede ser aplicada sola o en combinación con otros protocolos de quimioterapia, radioterapia o cirugía.[1]

**Figura 1**

La metodología de PDT (**Figura 1**) consiste en el suministro intravenoso del PS que se acumulará en el tejido tumoral, seguido de su iluminación con luz de longitud de onda adecuada capaz de penetrar tejidos. Esto genera un estado electrónico excitado que permite la interacción del PS con biomoléculas próximas (lípidos, proteínas, ácidos nucleicos…), mediante procesos de transferencia electrónica. La reacción con el oxígeno molecular presente en el medio celular produce especies reactivas de oxígeno (radicales, peróxido de hidrógeno…) así como oxígeno singlete ($^1O_2$). Dichas moléculas son capaces de iniciar reacciones en cadena y son las principales responsables de los daños oxidativos y la muerte celular.

Un agente PS ideal[2a] debe tener elevada pureza y estabilidad, así como una composición química conocida. Además, debe acumularse preferentemente sobre las células objetivo, presentando toxicidad mínima en ausencia de luz y actuando solo bajo fotoactivación, excretándose fácilmente del organismo para evitar efectos sistémicos. Es necesario que presenten buenos rendimientos cuánticos de producción de oxígeno singlete y coeficientes de extinción molar elevados con alta absorbancia en el rojo y rojo lejano del espectro UV-vis (región de 600-800 nm), para que la luz sea capaz de penetrar en los tejidos.

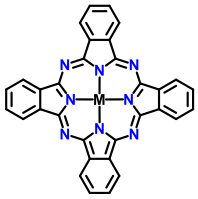



Figura 2

**Los derivados metalados de ftalocianinas (Pcs)** (**Figura 2**), presentan un gran potencial como PS en PDT. Las Pcs son sistemas bidimensionales aromáticos de 18 electrones $\pi$ que presentan elevada absorción en la región visible del espectro UV-vis de 630 a 750 nm, principalmente en el IR cercano donde la transparencia de los tejidos es relativamente alta, y son capaces de producir oxígeno singlete con gran eficiencia. Por sus cualidades, un gran número de derivados de ftalocianina ya han sido testados como PS en experimentos de PDT tanto *in vitro* como *in vivo*.[2x°]

Las ftalocianinas que contienen Zn(II), Al(III), Si(IV) o Ru(II) como átomo metálico en la cavidad central son las que muestran buena eficiencia en PDT, y la posibilidad de funcionalizar selectivamente su estructura periférica aporta a este tipo de complejos una gran versatilidad, permitiendo obtener compuestos solubles en los medios biológicos de interés. Sin embargo, hay que tener en cuenta que las moléculas

[1] a) M. R. Hamblin, T. Hasan, *Photochem. Photobiol. Sci.* **2004**, *3*, 436; b) T. Dai, Y. Y. Huang, M. R. Hamblin, *Photodiagn. Photodyn.* **2009**, *6*, 170.

[2] a) A. Juarranz, P. Jaén, F. S. Rodriguez, J. Cuevas, S. Gonzalez, *Clin. Transl. Oncol.* **2008**, *10*,148. b) A. P. Castanp, T. N. Demidova, M. Hamblin, *Photodiagn. Phodyn.* **2004**, *1*, 279.

altamente hidrófilas no pueden atravesar la membrana celular hidrofóbica, lo que da lugar a una absorción celular deficiente en los tejidos objetivo. En este sentido, la preparación de Pcs anfifílicas por sustitución asimétrica del anillo de Pc ha sido recientemente explorada, ya que las moléculas con un marcado carácter anfífilo atraviesan más fácilmente la membrana celular. Por otro lado, muchos cromóforos aromáticos anfífilos dan lugar a estructuras auto-ensambladas en disolución acuosa. En el caso de las Pcs y su uso como PS, esta propiedad puede ser usada para crear nanoestructuras en medio acuoso (ver **Figura 3**) que facilitan su transporte por el torrente sanguíneo y la internalización en la célula mediante un proceso de endocitosis. Además, una vez en el interior celular, el PS anfífilo puede disociarse debido al mayor carácter hidrófobo, y recuperar en el interior celular las propiedades de generación de oxígeno singlete que podrían haberse perdido mientras se encuentran agregadas en medio acuoso. Esta estrategia ha sido recientemente validada en nuestro grupo de investigación, donde se han preparado recientemente dos PS basados en Zn(II)Pcs anfífilas con una estructura AABB similar a la representada en la **Figura 31**.[3] Los PS preparados son solubles en medio acuoso, formando nanoestructuras de tipo micelar que se han mostrado muy eficaces en ensayos de terapia fotodinámica.

***Basándonos en estos antecedentes, los objetivos concretos de este trabajo de fin de máster son*:**

Preparar nuevos derivados de Pc anfífilas, solubles en agua y con capacidad para atravesar la membrana celular para su uso como PS en terapia fotodinámica. Para ello:

**a)** Se sintetizará la Zn(II)Pc anfifílica **3** representada en la **Figura 3**, así como otros compuestos relacionados, con un elevado carácter hidrófilo marcado por la presencia de ***sustituyentes catiónicos o carbohidratos*** que aportan ***solubilidad en agua y en medios biológicos*** a las ftalocianinas objetivo. Las ftalocianinas se preparan, de manera general, por reacción de ciclotetramerización de derivados de ftalonitrilo. Para obtener ftalocianinas funcionalizadas con diferentes grupos en la periferia, es necesario recurrir a métodos de condensación cruzada entre dos ftalonitrilos precursores diferentemente funcionalizados, obteniéndose en general una mezcla estadística de productos con diferentes sustituyentes. Para obtener ftalocianinas anfífilas como **3** de manera quasi-selectiva, la estrategia a seguir es el uso de bisftalonitrilos derivados de (R)- 2-binaftol como **1**. La presencia de un espaciador rígido entre los dos ftalonitrilos hace que los dos isoindoles resultantes permanezcan adyacentes en la ftalocianina final. Además, debido a la rigidez, la auto-condensación de **1** prácticamente no tiene lugar. Por ello, **1** se hará reaccionar con un ftalonitrilo sin funcionalizar (**2**), obteniéndose mayoritariamente un precursor de **3** con triples enlaces en los anillos de binaftol. La presencia de grupos etinilo terminales permite llevar a cabo reacciones de cicloadición 1,3-dipolar de tipo click, altamente eficientes, que permitirán a su vez introducir los restos hidrofílicos de tipo catiónico, o derivados de carbohidratos.

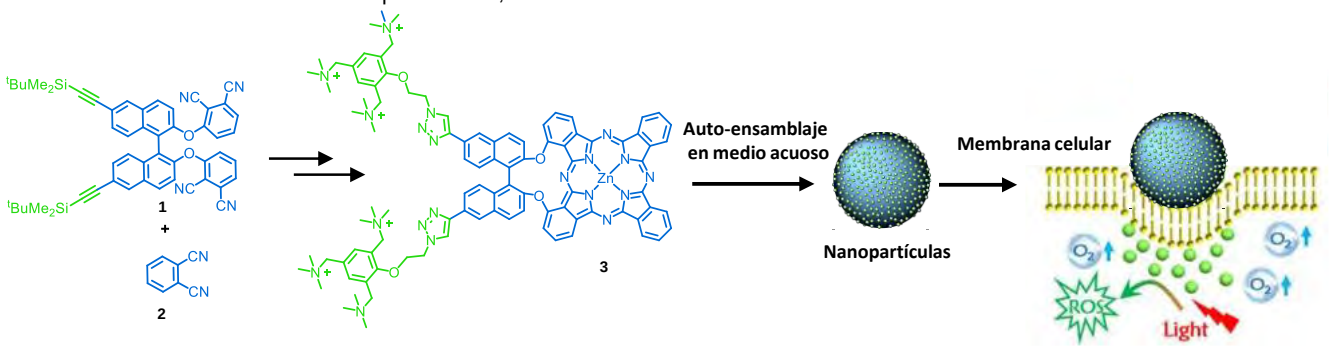



**Figura 3**

**b)** Se caracterizarán las Zn(II)Pc anfífilas preparadas, incluyendo el estudio detallado de sus ***propiedades de absorción y emisión***, así como de su capacidad para ***generar oxígeno singlete***.

**c)** Se estudiará la posibilidad de ***organizar las Pcs anfífilas preparadas*** en micelas o sistemas vesiculares, ***mediante su autoensamblado en las condiciones adecuadas***. Hay que remarcar que la presencia del ***binaftol quiral*** puede inducir la formación de ***sistemas autoensamblados quirales***, lo que nos permitiría estudiar el efecto de la quiralidad en la incorporación del PS en las células tumorales.

**d)** Se realizarán ensayos in vitro en colaboración con grupos expertos en el área para determinar el potencial de los sistemas preparados como PS.

**Capacidades y conocimientos recomendables que debe tener el estudiante para la realización de este proyecto:** es recomendable, cursar la asignatura optativa de Química Supramolecular y/o Materiales Orgánicos y Nanotecnología.

**Indíquese cualquier otra aclaración que se considere que pueda ayudar a los estudiantes en la elección del TFM:** el proyecto tiene un marcado carácter sintético, aunque permite adquirir conocimientos en áreas como la fotofísica y los ensayos biológicos *in vitro*.

Fecha:05-07-2021

Firma de los directores del proyecto:

[3] M. Á. Revuelta-Maza, E. de las Heras, M. Agut, S. Nonell, T. Torres, G. de la Torre, *Chem. Eur. J.* **2021**, *27*, 4955-4963.

MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGÁNICA

# PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL 2020-21 (TFM)

## DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE


| | |
|---|---|
| **Apellidos y nombre del director(es) del proyecto:**<br>Javier Adrio | |
| **Cargo:**<br>Profesor Titular | |
| **Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto:**<br>Química Orgánica, Facultad de Ciencias, Universidad Autónoma de Madrid. | |
| **Teléfono directo**<br>**914973874** | **e-mail**<br>javier.adrio@uam.es |

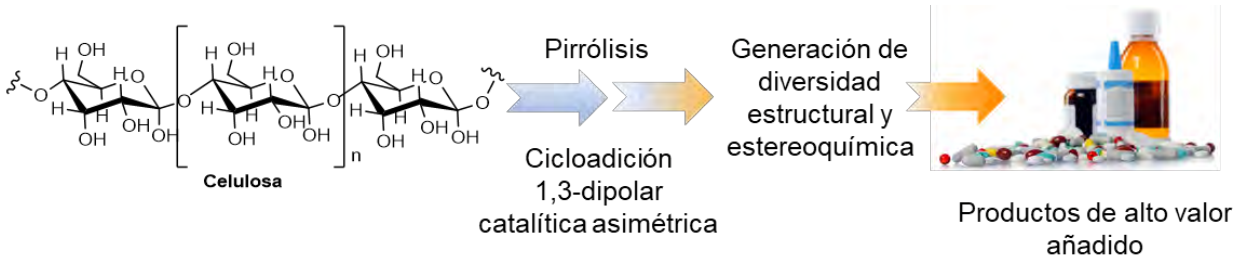

## DATOS DEL PROYECTO

**Título:** **Revalorización de biomasa mediante reacciones de cicloadición 1,3-dipolar**

**Breve descripción de los objetivos, contenido del proyecto y tareas a realizar**

La utilización de plataformas moleculares renovables derivadas de la biomasa, en lugar de las obtenidas del petróleo, para la obtención de productos de alto valor añadido es un objetivo prioritario dentro de la Química actual. Como consecuencia numerosos grupos de investigación están dedicando un gran esfuerzo al desarrollo de metodologías que permitan transformar este tipo de productos de partida en productos de interés para la industria Química.

Aunque el empleo de productos de partida derivados de la biomasa en Síntesis Orgánica ha recibido un creciente interés en los últimos años, prácticamente no se han descrito metodologías que permitan la conversión directa de estos materiales en productos quirales enantienriquecidos mediante procedimientos basados en catálisis asimétrica. En esta propuesta de trabajo de fin de Máster nos planteamos emplear la reacción de cicloadición 1,3-dipolar catalítica asimétrica desarrollada previamente por nuestro grupo de investigación para la generación de pirrolidinas enantioenriquecidas a partir de derivados obtenidos a partir de la biomasa.




**Capacidades y conocimientos recomendables que debe tener el estudiante para la realización de este proyecto**

Las recomendadas para la realización del máster en Química Orgánica.

**Indíquese cualquier otra aclaración que se considere que pueda ayudar a los estudiantes en la elección del TFM**

Debido a la naturaleza interdisciplinar de la química organometálica, durante la realización de este trabajo el solicitante podrá ampliar y consolidar los conocimientos alcanzados en las asignaturas de Máster relacionadas con las áreas de química orgánica y química organometálica. Adicionalmente, adquirirá experiencia en las técnicas de caracterización y elucidación estructural de compuestos orgánicos (resonancia magnética nuclear, espectrometría de masas, …), así como de determinación de excesos enantioméricos (HPLC con fase estacionaria quiral). Por último, se familiarizará con el empleo de las bases de datos más importantes para la realización de búsquedas bibliográficas.

MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGÁNICA

# PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL 2021-22 (TFM)

## DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE


| | |
|---|---|
| **Apellidos y nombre del director(es) del proyecto:**<br>Javier Adrio | |
| **Cargo:**<br>Profesor Titular | |
| **Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto:**<br>Química Orgánica, Facultad de Ciencias, Universidad Autónoma de Madrid. | |
| **Teléfono directo**<br>**914973874** | **e-mail**<br>javier.adrio@uam.es |


## DATOS DEL PROYECTO

**Título:**

## Síntesis y evaluación de la actividad antimalárica y anti-covid-19 de derivados de 2-carboximetilpirrol

**Breve descripción de los objetivos, contenido del proyecto y tareas a realizar**

La malaria es una enfermedad causada por el parásito Plasmodium que se trasmite a través de la picadura del mosquito Anopheles. Se estima, que a pesar de los grandes avances logrados tanto en el desarrollo de nuevos tratamientos como en el control del vector, la enfermedad todavía causa unas 400.000 muertes al año en los países más desfavorecidos. Por lo tanto, existe una urgente necesidad de desarrollar nuevos fármacos que presenten mayor eficacia y seguridad. Esta premura se ve reforzada por que el parásito ha generado resistencias a alguno de los tratamientos que se han usado con éxito durante años.

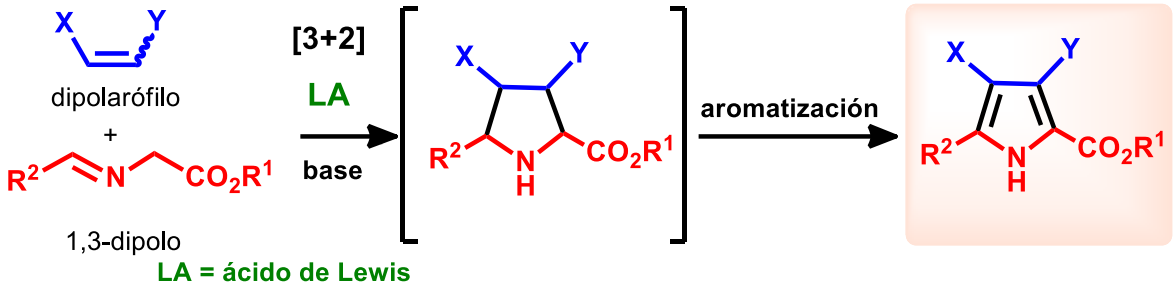
En este contexto, nuestro grupo investigador en colaboración con la empresa farmacéutica GSK España ha encontrado una nueva molécula con estructura de pirrol con una muy prometedora actividad antimalárica, que podría constituir una nueva alternativa para el tratamiento de la enfermedad. En este proyecto se pretende sintetizar una amplia gama de derivados de 2-carboxipirrol, con el propósito de realizar un estudio de relación estructura actividad para determinar los vínculos entre los parámetros estructurales y la actividad de los compuestos.

Varios compuestos con una notoria actividad antiparasitaria como la Hidroxicloroquina o la Ivermectina. Han mostrado importante actividad antiviral. Estos resultados han impulsado a numerosos grupos de investigación a investigar antiparasitarios como potenciales compuestos activos frente al COVID-19. En un estudio preliminar realizado por nuestro grupo de investigación en colaboración con el grupo de Pablo Gastaminza y Urtzi Garaigorta del Centro Nacional de Biotecnología-CSIC. Los compuestos anteriormente mencionados han mostrado una prometedora actividad antiviral en modelos de infección en cultivos celulares.

La síntesis de los pirroles objeto del estudio se llevará a cabo mediante un proceso de cicloadición 1,3-dipolar y posterior aromatización. Este proceso nos permitirá mediante cambios en la estructura del dipolo o del

dipolarófilo acceder a una amplia gama de pirroles diferentemente sustituidos en las cuatro posiciones carbonadas del anillo heteroaromático. Una vez preparada una batería de sustratos se procederá a su evaluación biológica en la empresa farmacéutica GSK (actividad antimalárica) y en el grupo del Prof. Pablo Gastaminza CNB (actividad antiviral).

**Reacción de cicloadición 1,3 dipolar con iluros de azometino**




**Objetivo: Desarrollo de una batería de compuestos para realizar estudios de SAR**

**Capacidades y conocimientos recomendables que debe tener el estudiante para la realización de este proyecto**

Las recomendadas para la realización del máster en Química Orgánica.

**Indíquese cualquier otra aclaración que se considere que pueda ayudar a los estudiantes en la elección del TFM**

Durante la realización de este trabajo el solicitante podrá ampliar y consolidar los conocimientos alcanzados en las asignaturas de Máster relacionadas con las áreas de química orgánica y química médica. Adicionalmente, adquirirá experiencia en las técnicas de caracterización y elucidación estructural de compuestos orgánicos (resonancia magnética nuclear, espectrometría de masas, …). Por último, se familiarizará con el empleo de las bases de datos más importantes para la realización de búsquedas bibliográficas.

MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGÁNICA

# PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL 2020-21 (TFM)

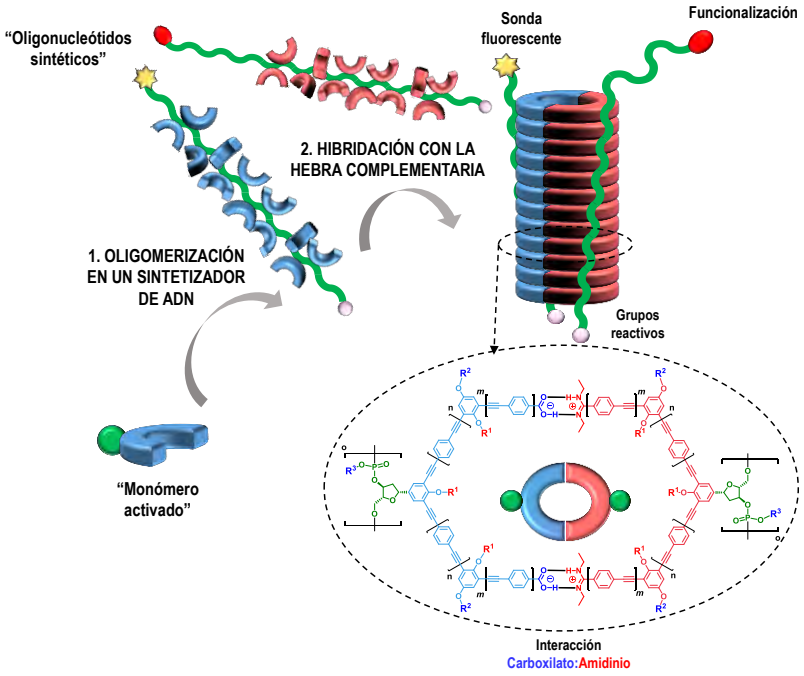
## DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE


| | |
|---|---|
| **Apellidos y nombre del director(es) del proyecto:** Gonzalez Rodriguez, David y López Martín, Isabel | |
| **Cargo:** Profesor Titular, Investigadora Predoctoral | |
| **Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto:**<br>Departamento de Química Orgánica, Universidad Autónoma de Madrid<br>Facultad de Ciencias, C/Francisco Tomás y Valiente 7 – Módulo 11, Lab 602. | |
| **Teléfono directo:** 914973758 | **e-mail:** david.gonzalez.rodriguez@uam.es |


## DATOS DEL PROYECTO

**Título:** Síntesis de un Nanorobot Molecular

La generación de Nanorobots- máquinas programables de dimensiones nanométricas capaces de ejecutar de manera autónoma diversas tareas (biomédicas) complejas- sigue siendo un objetivo considerado como ciencia ficción. Este trabajo se engloba en un proyecto donde pretendemos desarrollar una nueva estrategia en el diseño de Nanorobots a través de la combinación de la química supramolecular y la síntesis orgánica. Por un lado, se sintetizarán fragmentos semicirculares π-conjugados equipados con grupos funcionales amidinio y/o carboxilato. Dos hebras artificiales semejantes a las hebras de ADN serán preparadas en un sintetizador de ADN a partir de los fragmentos semicirculares anteriores, los cuales permitirán la hibridación a través de interacciones no covalentes entre ambos grupos funcionales dando lugar a un nanotubo helicoidal cuya estructura puede ser controlada con precisión. Dicho proceso supramolecular se estudiará mediante técnicas espectroscópicas avanzadas (RMN, UV-vis, CD, fluorescencia) y de microscopia (AFM, TEM) que el alumno aprenderá a utilizar. Esta síntesis modular y control estructural nos permitirán integrar diversas funciones adaptables que podrían trabajar independientemente o de forma cooperativa, imitando los pasos iniciales en la infección de una célula por un Virus: reconocimiento de la célula e interacción con los receptores de la superficie extracelular y transporte de sustancias (fármacos en este caso) hacia el interior de la membrana.




**Capacidades y conocimientos recomendables que debe tener el estudiante para la realización de este proyecto**

El alumno debe tener conocimientos de Química Orgánica y Determinación Estructural. El alumno debe tener interés por estas materias en general y por su aportación a otras áreas de la Ciencia. Este proyecto está también muy ligado a la asignatura optativa de Nanoquímica. Las asignaturas de Máster de Química Supramolecular y Materiales Moleculares son también importantes en este proyecto, aunque no imprescindibles.

**Indíquese cualquier otra aclaración que se considere que pueda ayudar a los estudiantes en la elección del TFM**

Se trata de un proyecto multidisciplinar aplicado, centrado en la Química Orgánica, pero que engloba distintos conceptos y hace uso de diversas técnicas que el alumno ha aprendido en asignaturas del grado en Química, o aprenderá en el Master en Química Orgánica.

MASTERQO
MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGÁNICA

# PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL 2021-22 (TFM)

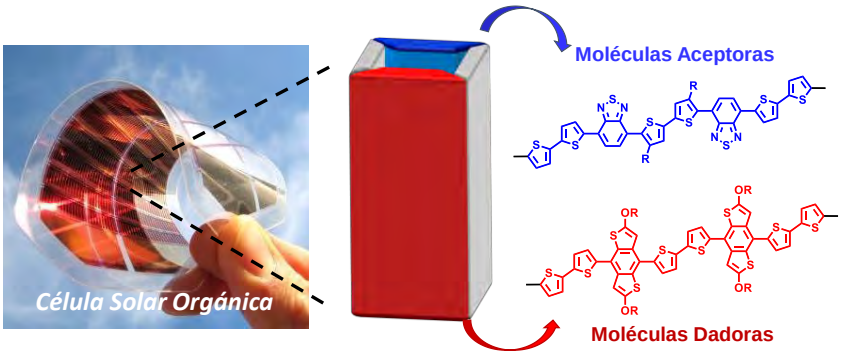
## DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE


| | |
|---|---|
| **Apellidos y nombre del director(es) del proyecto:** González Rodríguez, David y González Sánchez, Marina | |
| **Cargo:** Profesor Titular, Investigadora Predoctoral | |
| **Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto:**<br>Departamento de Química Orgánica, Universidad Autónoma de Madrid<br>Facultad de Ciencias, C/Francisco Tomás y Valiente 7 – Módulo 11, Lab 602. | |
| **Teléfono directo:** 914972778 | **e-mail:** david.gonzalez.rodriguez@uam.es |


## DATOS DEL PROYECTO

**Título:** Sistemas π-conjugados autoorganizados para células solares orgánicas

**Breve descripción de los objetivos, contenido del proyecto y tareas a realizar**




La investigación en el desarrollo de fuentes de energía renovables, y en concreto aquellas que utilizan la luz del sol, cobra cada vez más importancia en una sociedad que depende enormemente de combustibles fósiles y que genera cantidades crecientes de $CO_2$. Este trabajo se enmarca en un proyecto multidisciplinar que se centra en entender el papel de la organización molecular en la eficiencia de células solares orgánicas, es decir, compuestas por moléculas y polímeros orgánicos. Pretendemos organizar dichas moléculas de forma adecuada en la escala nanométrica con el fin de optimizar distintos parámetros que influyen en la eficiencia fotovoltaica. El/la alumno/a llevará a cabo la síntesis de moléculas π-conjugadas (colorantes) de naturaleza dadora o aceptora de electrones y las dotará de información supramolecular, mediante el acoplamiento de determinadas bases nucleicas y otros grupos capaces de formar enlaces de hidrógeno, con el fin de guiar su autoensamblaje en una estructura definida. Dicho proceso supramolecular se estudiará mediante técnicas espectroscópicas avanzadas (RMN, UV-vis, CD, fluorescencia) y de microscopia (AFM, TEM) que el alumno aprenderá a utilizar.

**Capacidades y conocimientos recomendables que debe tener el estudiante para la realización de este proyecto**

El alumno debe tener conocimientos de Química Orgánica y Determinación Estructural. El alumno debe tener interés por estas materias en general y por su aportación a otras áreas de la Ciencia (especialmente, polímeros y materiales). Este proyecto está también ligado a la asignatura optativa de Nanoquímica. Las asignaturas de Máster de Química Supramolecular y Materiales Moleculares son también importantes en este proyecto, aunque no imprescindibles.

**Indíquese cualquier otra aclaración que se considere que pueda ayudar a los estudiantes en la elección del TFM**

Se trata de un proyecto multidisciplinar aplicado, centrado en la Química Orgánica, pero que engloba distintos conceptos y hace uso de diversas técnicas que el alumno ha aprendido en asignaturas del grado en Química, o que aprenderá en el Master en Química Orgánica.

MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGÁNICA

# PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL 2021-22 (TFM)

## DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE

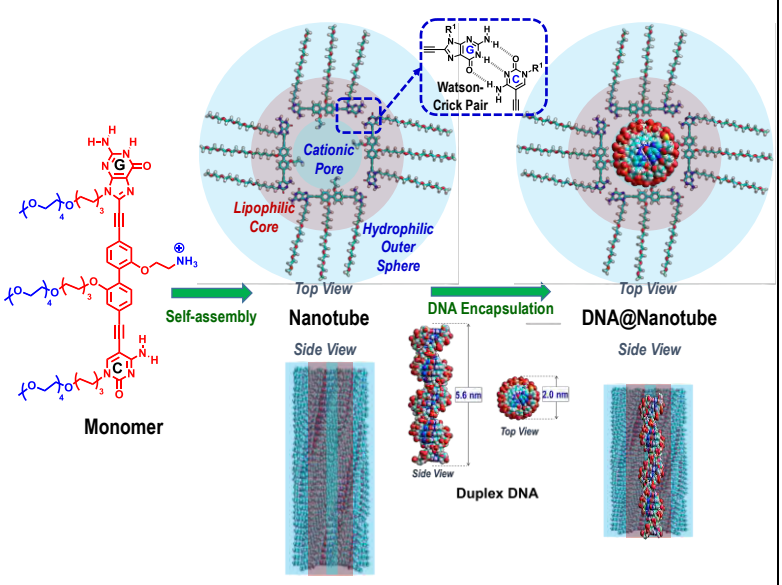

| | |
|---|---|
| **Apellidos y nombre del director(es) del proyecto:** Aparicio Hernández, Fátima y González Rodríguez, David | |
| **Cargo:** Profesor Titular e Investigadora Postdoctoral "Marie Curie" (MSCA-IF) | |
| **Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto:**<br>Departamento de Química Orgánica, Universidad Autónoma de Madrid<br>Facultad de Ciencias, C/Francisco Tomás y Valiente 7 – Módulo 11, Lab 602. | |
| **Teléfono directo:** 914973758 | **e-mail:** fatima.aparicio@uam.es / david.gonzalez.rodriguez@uam.es |


## DATOS DEL PROYECTO

**Título:** Reconocimiento y Encapsulación de ADN en Nanotubos Autoensamblados

**Breve descripción de los objetivos, contenido del proyecto y tareas a realizar**

El reconocimiento, encapsulación y transporte de ADN en medios fisiológicos, en el interior de sistemas autoensamblados que protejan al ADN de su destrucción por nucleasas, constituye un importante desafío en biomedicina, más aún en el marco del actual auge y necesidad de vacunas basadas en ARN mensajero. En concreto, al tratarse de biopolímeros lineales, el desarrollo de **nanosistemas capaces de autoorganizarse en estructuras tubulares** e integrarse en membranas lipídicas supondría una herramienta poderosa y versátil para al transporte de ADN al interior de la célula. Este proyecto se centra en el **desarrollo de prototipos sencillos de canales transmembrana capaces de alojar y transportar ADN**. En concreto, se estudiarán estrategias de síntesis no covalente de nanoestructuras tubulares capaces de reconocer y albergar ADN dúplex. Se llevará a cabo la síntesis de moléculas funcionalizadas con bases nucleicas a partir de metodologías descritas en el grupo de investigación. En una segunda fase, se estudiará su autoensamblaje en nanotubos mediante enlaces de hidrogeno y fuerzas solvofóbicas, tal y como muestra la figura. Dotando al poro de dichos nanotubos de sustituyentes catiónicos, éste será capaz de reconocer y encapsular ADN dúplex en su interior. Se pretende que la encapsulación de ADN, que se puede adquirir con una secuencia y longitud controlada, regule el tamaño de los propios nanotubos, en un proceso que bio-mimetiza la asociación de la cápside proteica del virus del mosaico del tabaco. Estos procesos se estudiarán mediante técnicas espectroscópicas avanzadas (RMN, UV-vis, CD, fluorescencia) y de microscopia (AFM, TEM).




**Capacidades y conocimientos recomendables que debe tener el estudiante para la realización de este proyecto**

El alumno debe tener conocimientos de Química Orgánica y Determinación Estructural. El alumno debe tener interés por estas materias en general y por su aportación a otras áreas de la Ciencia. Este proyecto está también muy ligado a la asignatura optativa de Nanoquímica. Las asignaturas de Máster de Química Supramolecular y Materiales Moleculares son también importantes en este proyecto, aunque no imprescindibles.

**Indíquese cualquier otra aclaración que se considere que pueda ayudar a los estudiantes en la elección del TFM**

Se trata de un proyecto multidisciplinar aplicado, centrado en la Química Orgánica, pero que engloba distintos conceptos y hace uso de diversas técnicas que el alumno ha aprendido en asignaturas del grado en Química, o aprenderá en el Master en Química Orgánica.

MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGÁNICA

# PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2021-22

## DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE

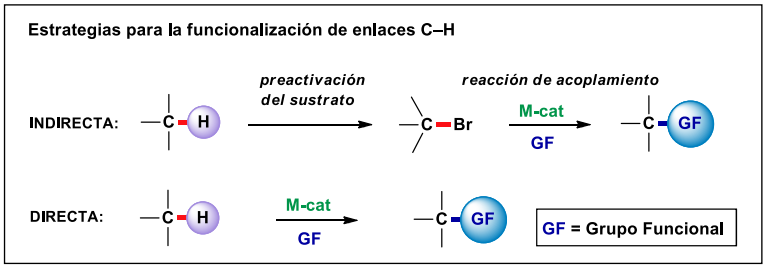

| | |
|---|---|
| **Apellidos y nombre del director(es) del proyecto:** Garcia Viada, Andrés & Rodríguez Garrido, Nuria | |
| **Cargo:** Estudiante de doctorado y Profesor Contratado Doctor, respectivamente | |
| **Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto:** Departamento de Química Orgánica | |
| **Teléfono directo:** Andrés: 4709; Nuria: 2771 | **e-mail:** andres.garciav@uam.es; n.rodriguez@uam.es |


## DATOS DEL PROYECTO

**Título:** Funcionalización catalítica de enlaces C–H en posiciones remotas de derivados de péptidos.

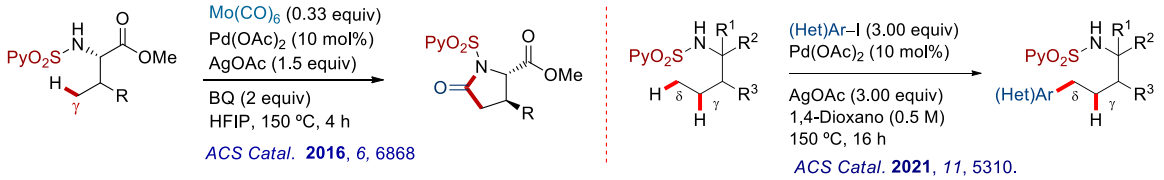
**Breve descripción de los objetivos y contenido del proyecto y tareas a realizar**

Los compuestos nitrogenados y derivados de amino ácido son elementos estructurales presentes en numerosos productos naturales y compuestos biológicamente activos. Por tanto, existe un interés constante en el diseño de estrategias sintéticas que permitan introducir diversidad funcional en su estructura básica de una forma rápida y eficaz para lograr disponer de una batería, lo más diversa posible, de derivados con los que realizar los estudios correspondientes de optimización estructura-actividad en química médica. En este contexto, la funcionalización directa de enlaces C–H mediante catálisis metálica es una alternativa muy poderosa para el desarrollo de estrategias convergentes en el marco de la "química sostenible" y una de las áreas más activas de la química orgánica actual.[1]

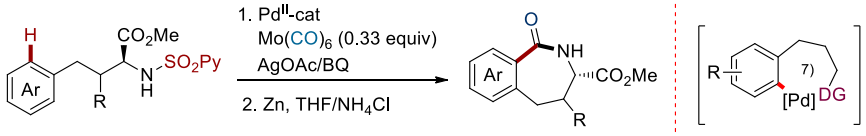



En especial, la síntesis de aminoácidos no naturales y la funcionalización post-sintética de péptidos son algunas de las aplicaciones más interesantes de esta química.[5] En este área, nuestro grupo investigador ha demostrado que el grupo director (2-piridil)sulfonilo ($SO_2Py$) es un grupo muy eficaz para la activación remota de enlaces C($sp^3$)–H. Así, empleando esta estrategia, hemos desarrollado un método de carbonilación C-H catalizada por paladio, selectiva en la posición $\gamma$ de $\alpha$-aminoácidos y aminas N-$SO_2Py$ protegidas empleando $Mo(CO)_6$ como una fuente segura de CO. Esta reacción es una herramienta muy potente para la derivatización de aminas en las correspondientes $\gamma$-lactamas. Estudios mecanísticos han permitido aislar y caracterizar mediante difracción por rayos X un complejo bimetálico de $Pd^{II}$ $\gamma$-metalado (complejo **I**), que demuestra el importante papel que juega el grupo director. Esta coordinación ha resultado ser también clave para lograr la funcionalización regioselectiva en la posición $\delta$ de $\alpha$-amino ácidos que presentan la posición y accesible.

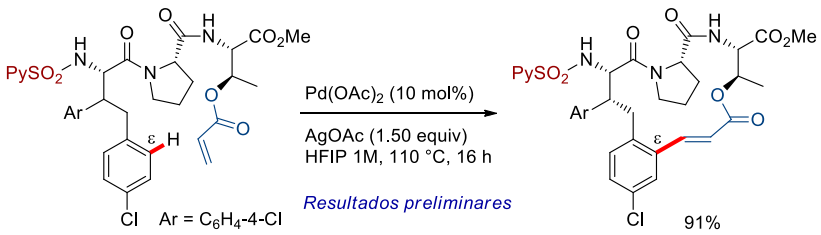
[1] Para una revisión bibliográfica general sobre la funcionalización C–H, véase: S. Shabani, Y. Wu, H. G. Ryan, C. A. Hutton, *Chem. Soc. Rev.* **2021**, DOI: 10.1039/d0cs01441a.




Sin embargo, métodos que permitan la funcionalización de enlaces C–H que se encuentran a más de 4 o 5 enlaces del heteroátomo coordinante del grupo director (*activación C–H remota*)[45] son muy escasos debido a la dificultad de alcanzar estados de transición que implican metalaciclos de más de 5 o 6 eslabones. De hecho, son muy escasos los métodos basados en funcionalización C–H que permitan la construcción de anillos de 7. Recientemente, nuestro grupo ha logrado superar esta limitación y ha descrito el primer método de síntesis de benzazepinonas mediante una carbonilación C–H / ciclación de derivados de γ-arilpropilaminas N-$SO_2$Py protegidas. En su conjunto, estos estudios demuestran que el grupo $SO_2$Py permite la funcionalización de posiciones alejadas del grupo director a través de paladaciclos de alto orden.




A ello se suma, el potencial del grupo $SO_2$Py como grupo director aun incluso en procesos en los que se lleva a cabo la funcionalización post-sintética de estructuras complejas como son los péptidos. La modificación post-sintética de péptidos cuando se buscan candidatos biológicamente activos es actualmente una aproximación de elevado interés en la industria farmacéutica. Actualmente, nuestro grupo de investigación ha abierto una línea en la que se persigue el ***diseño y desarrollo de nuevas estrategias sintéticas y elementos de control para conseguir llevar a cabo la macrociclación de péptidos lineales mediante procesos de funcionalización de enlaces C–H. Los péptidos cíclicos son importantes moléculas farmacológicamente activas en el descubrimiento de fármacos debido a su alta especificidad y su baja toxicidad***. En base a estudios preliminares que se han obtenido en nuestro grupo, el presente TFM se enmarcará dentro de este objetivo, estudiando la ciclación de péptidos lineales a través de un proceso de alquenilación intramolecular C($sp^2$)–H asistido por el grupo director *N*-$SO_2$Py y catalizado por Pd.




**Capacidades y conocimientos recomendables que debe tener el estudiante para la realización de este proyecto**

Conocimientos básicos de química orgánica y determinación estructural de compuestos orgánicos

**Indíquese cualquier otra aclaración que se considere que pueda ayudar a los estudiantes en la elección del TFM**

Uno de los aspectos más destacables del presente proyecto es su elevada capacidad formativa. La catálisis metálica es un área puntera e interdisciplinar en la que confluyen la síntesis orgánica, la química organometálica, la química de coordinación y la química computacional, por lo que constituye una plataforma privilegiada para la formación integral de investigadores en química.

**Fecha: 14-07-2021**

**Firma de los directores del proyecto:**

Andrés Garcia Viada

Nuria Rodríguez Garrido

MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGÁNICA

# PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2021-22

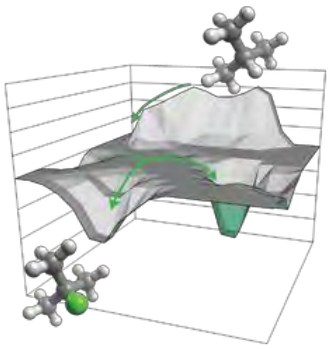
## DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE


| | |
|---|---|
| **Apellidos y nombre del director(es) del proyecto:** Alonso Montero, Inés y Rodríguez Garrido, Nuria | |
| **Cargo:** Titular y Profesor Contratado Doctor, respectivamente | |
| **Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto:** Departamento de Química Orgánica | |
| **Teléfono directo:** Inés: 3876; Nuria: 2771 | **e-mail:** ines.alonso@uam.es; n.rodriguez@uam.es |


## DATOS DEL PROYECTO

**Título:** Funcionalización directa de enlaces C–H en α-aminoácidos. Estudio mecanístico (teórico y experimental).

**Breve descripción de los objetivos, contenido del proyecto y tareas a realizar**

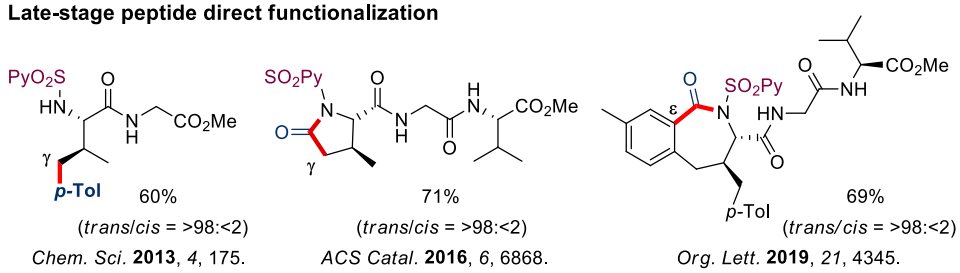


En la actualidad, existe un número cada vez más extenso de aplicaciones de la Química, en las que **el concurso de la Química Teórica y la Modelización Computacional es inevitable si se pretende profundizar en el conocimiento de los fenómenos estudiados**. Un ejemplo paradigmático es su repercusión en la **racionalización de la reactividad y selectividad observada en procesos de funcionalización directa de enlaces C–H mediante catálisis metálica**. Este conocimiento es necesario para el desarrollo de catalizadores cada vez más eficientes, que permitan aplicar esta estrategia sintética para la preparación de productos estructuralmente complejos, con aplicación en sectores relevantes de la industria química, como el farmacéutico o el agroquímico, de importancia vital para nuestra sociedad.

En este contexto, nuestro grupo ha sido pionero en el desarrollo de metodologías para la funcionalización directa y selectiva de aminoácidos (AAs), accediendo de forma rápida a bibliotecas de AAs no naturales que son de gran interés para el desarrollo de terapias basadas en moléculas con naturaleza peptídica. Estas terapias han disparado el interés de la comunidad científica dada su menor toxicidad y mayor especificidad en comparación con otros fármacos.

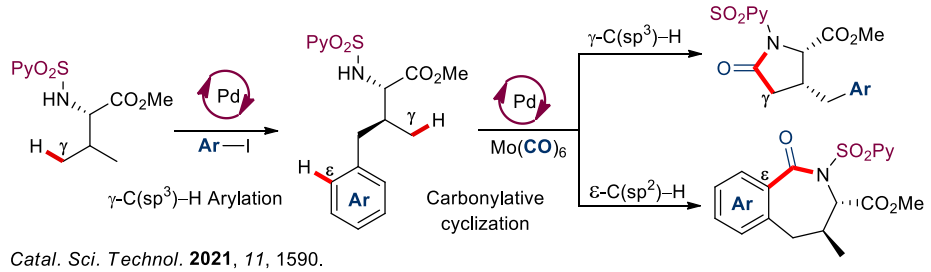
El elemento común de estos procesos es el empleo del auxiliar temporal (2-piridil)sulfonilo ($SO_2Py$) introducido en el grupo $–NH_2$ del AA como herramienta para el control de la selectividad. Dicho grupo se coordina al catalizador, dirigiéndolo, con el ángulo y la distancia adecuados, para interaccionar con el enlace C–H que se desea funcionalizar. De este modo, se han funcionalizado las posiciones remotas γ y ε, en procesos de arilación y carbonil-ciclación, llevados a cabo tanto con AAs como con dipéptidos y tripéptidos, como se indica en la figura. Ello demuestra el papel clave del grupo *N*-$SO_2Py$ como grupo director y su capacidad para anular otros elementos de coordinación inherentes a estos sustratos. Recientemente, la racionalización de esta reactividad y selectividad nos ha permitido desarrollar una metodología para la funcionalización divergente de AAs.

**Late-stage peptide direct functionalization**




*Chem. Sci.* **2013**, *4*, 175. *ACS Catal.* **2016**, *6*, 6868. *Org. Lett.* **2019**, *21*, 4345.

**Structural diversity through selectivity control**




*Catal. Sci. Technol.* **2021**, *11*, 1590.

En el marco de esta línea de investigación, en el presente trabajo se pretende diseñar una **metodología catalítica para llevar a cabo la funcionalización directa de enlaces C(sp$^3$)–H en las cadenas lineales de los AAs, empleando catálisis con Pd**. El alumno se especializará en la síntesis de compuestos orgánicos (AAs y sus precursores) y organometálicos, y el diseño de reacciones catalíticas. De forma paralela al estudio experimental, se llevará a cabo el estudio teórico de estas reacciones mediante cálculos DFT con el paquete de programas Gaussian. Los modelos utilizados intentarán reproducir los resultados experimentales aportando información del transcurso del proceso a nivel molecular. De este modo, el estudio teórico permitirá el diseño de modificaciones para mejorar la reactividad de estos sistemas, explicar resultados anómalos observados experimentalmente y encontrar unas condiciones donde este tipo de reactividad se pueda convertir en una vía sintéticamente útil para distintos tipos de productos.

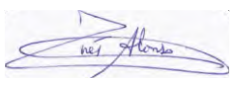
**Capacidades y conocimientos recomendables que debe tener el estudiante para la realización de este proyecto**

El alumno deberá tener conocimientos básicos de química orgánica, organometálica y química de coordinación, así como de las técnicas de determinación estructural de compuestos orgánicos. También deberá tener conocimientos de química computacional, por lo que es muy recomendable cursar la correspondiente asignatura optativa que le permitirá aprender a manejar las herramientas que necesitará en el desarrollo del proyecto.

**Indíquese cualquier otra aclaración que se considere que pueda ayudar a los estudiantes en la elección del TFM**

Este proyecto está orientado a promover la iniciación en tareas investigadoras en el ámbito de la *catálisis metálica*, área puntera e interdisciplinar donde confluyen la síntesis orgánica, la química organometálica, la química de coordinación y la química computacional. Por ello, trabajar en este campo permite alcanzar una formación integral para la investigación en química. Además de familiarizarse con el trabajo de laboratorio, la utilización habitual de técnicas de determinación estructural (RMN, espectrometría de masas), técnicas cromatográficas (HPLC, GC) y herramientas de cálculo computacional, completan la formación del estudiante en todos los aspectos mencionados.

Fecha: 13 de julio de 2021 Firma de los directores del proyecto:



Inés Alonso Montero

Nuria Rodríguez Garrido

MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGÁNICA

# PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2021-2022

## DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE


| | |
|---|---|
| **Apellidos y nombre del director(es) del proyecto:**<br>FRAILE CARRASCO, ALBERTO | |
| **Cargo:**<br>PROFESOR CONTRATADO DOCTOR | |
| **Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto:**<br>Departamento de Química Orgánica, Facultad de Ciencias, Universidad Autónoma de Madrid | |
| **Teléfono directo**<br>914973877 | **e-mail**<br>alberto.fraile@uam.es |


## DATOS DEL PROYECTO

**Título:** ***DESARROLLO DE NUEVOS PROCESOS FOTOCATALÍTICOS USANDO LUZ VISIBLE***

**Breve descripción de los objetivos, contenido del proyecto y tareas a realizar**

Desde el año 2008, la fotocatálisis, en presencia de luz visible, se ha convertido un área en auge debido a que ésta permite llevar a cabo reacciones que no son fáciles de conseguir usando las metodologías conocidas hasta la fecha. Además, en los últimos años, se han ido desarrollando y utilizando una serie de foto-organocatalizadores nuevos o ya conocidos que son capaces de activar sustratos sin la necesidad de utilizar catalizadores metálicos los cuales presentan una gran toxicidad. En el presente proyecto se van a estudiar y desarrollar nuevos procesos fotocatalíticos usando luz visible como fuente de energía y foto-organocatalizadores. Además, si es necesario, se sintetizarán nuevos foto-organocatalizadores con potenciales redox superiores a los existentes los cuales permitirán activar sustratos que, hasta la fecha, no se han podido utilizar debido a sus altos potenciales redox.

Durante la realización del TFM, el alumno realizará las siguientes tareas:

a) Desarrollo de estrategias encaminadas a realizar con éxito **búsquedas bibliográficas** vinculadas con la Química Orgánica con objeto de obtener la información necesaria para abordar el proyecto de investigación.
b) Consolidación de las habilidades adquiridas en las asignaturas experimentales cursadas previamente. El alumno se familiarizará de forma gradual con las **diversas técnicas de laboratorio** que le permitan abordar reacciones químicas de grado de complejidad creciente enmarcadas en un proyecto científico más amplio, todo ello sin olvidar la correcta manipulación de productos y residuos. Se pretende que el alumno consolide sus conocimientos previos en cuanto a las principales reacciones de los grupos funcionales orgánicos.
c) **Técnicas de purificación** de compuestos orgánicos (fundamentalmente técnicas cromatográficas de distinto grado de complejidad.
d) Caracterización y elucidación estructural de compuestos orgánicos a partir de sus datos físicos y **espectroscópicos**.
e) Adquisición de las habilidades necesarias para **racionalizar los resultados** obtenidos. El alumno será capaz de proponer un curso mecanístico plausible para las reacciones llevadas a cabo en el laboratorio con especial relevancia en el ***papel desempeñado por el catalizador***.
f) **Diseño y transformación** de los compuestos sintetizados en fragmentos estructurales presentes en moléculas biológicamente activas con interés farmacológico.

Para más información en las líneas de investigación de nuestro grupo, véase: www.uam.es/jose.aleman .

**Capacidades y conocimientos recomendables que debe tener el estudiante para la realización de este proyecto**

Es recomendable haber realizado el Trabajo Fin de Grado dentro del campo de la Química Orgánica

**Indíquese cualquier otra aclaración que se considere que pueda ayudar a los estudiantes en la elección del TFM**

MASTERQO
MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGÁNICA

# PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL 2021-22 (TFM)

## DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE


**Apellidos y nombre del director(es) del proyecto:**
TORRES CEBADA, Tomás

**Cargo:**
Catedrático de Química Orgánica

**Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto:**
Departamento de Química Orgánica, Facultad de Ciencias, Universidad Autónoma de Madrid, 28049-Madrid

| **Teléfono directo** | **e-mail** |
|---|---|
| 606101393 | tomas.torres@uam.es |


## DATOS DEL PROYECTO

**Título: Síntesis, reactividad y propiedades de subftalocianinas (II): quiralidad, metilación, fotosíntesis artificial y terapia fotodinámica de cáncer y antimicrobial**

**Breve descripción de los objetivos, contenido del proyecto y tareas a realizar**

El proyecto tiene como objetivo el diseño y la síntesis de nuevas subftalocianinas (SubPcs) apropiadas para ser utilizadas como elementos electrónicamente activos en una nueva generación de materiales moleculares. Se pretende con ello desarrollar las singulares propiedades ópticas y electrónicas de estos compuestos.

Desde un aspecto fundamental, el proyecto proporcionará una novedosa visión de la reactividad química de las subftalocianinas, de sus aspectos de quiralidad y organización a nivel supramolecular. Se trata de un proyecto sintético enfocado en el área de la nanociencia (Para SubPcs y compuestos relacionados de nuestro grupo, véase: *Chem. Rev.* **2014**, 2192; *Angew. Chem. Int. Ed.* **2015**, 54, 2543, *J. Am. Chem. Soc.,* **2017**, *139*, 17474, *J. Am. Chem. Soc.,* **2017**, *139,* 5520. *Science Advances*, **2017**, 3, e1701017, *Adv. Funct. Mater.*, **2018**, 28, 1705938, *Angew. Chem. Int. Ed.,* **2018**, 57, 16291, *Org. Lett.* **2019**, 21, 2908, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2019,** 58, 14644, *Angew. Chem. Int. Ed*. **2020**, 59, 1355, *J. Am. Chem. Soc.* **2020**, 142, 7920, *Angew. Chem. Int. Ed*. **2020**, 59, 3127, *Chem. Soc. Rev.* **2020***, 49,* 1041, *J. Am. Chem. Soc.* **2020***, 142,* 21017, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2020,** 59, 21224, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2021,** 60,1474).

Los objetivos concretos del proyecto son los siguientes:

- Preparacion de SubPcs enantioméricamente puras
- Preparación de SubPcs no metaladas y metaladas
- Organización de SubPcs a nivel supramolecular
- Deposicion de SubPcs y estudio de su química en superficies metálicas en Ultra-alto vacio (STM)
- Aplicaciones de SubPcs en fotosíntesis artificial, células solares y terapia fotodinamica

Para ello se utilizarán herramientas sintéticas tanto covalentes como supramoleculares. El proyecto se incluye en las actividades previstas en un proyecto de investigación nacional: "Futura Generacion de Ftalocianinas y Subftalocianinas para Fotovoltaica Molecular, Sintesis en Superficie, y Nanomedicina" MINECO, PID2020-116490GB-I00 (2021-2024).

**Capacidades y conocimientos recomendables que debe tener el estudiante para la realización de este proyecto**

Se requiere un(a) estudiante motivado(a) con buenos conocimientos de química orgánica sintética y elucidación estructural, e interés por áreas interdisciplinares relacionadas con la nanociencia.

No necesariamente se desarrollaran todos los apartados indicados arriba. Se hará una selección en función del interés de estudiante.

**Indíquese cualquier otra aclaración que se considere que pueda ayudar a los estudiantes en la elección del TFM**

Se pretende que este proyecto de Master sea la base para realizar una Tesis Doctoral en el grupo de Nanociencia y Materiales Moleculares de la UAM, por lo tanto, se requieren estudiantes con buen expediente académico. Contactar con Tomás Torres para cualquier aclaración en el teléfono o e-mail arriba indicado.

Fecha: 3 de Julio de 2021

Firmado: Tomas Torres

# PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2021-2022

## DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE


| | |
|---|---|
| **Apellidos y nombre del director(es) del proyecto: Rodríguez Morgade María Salomé** | |
| **Cargo: Profesora Titular** | |
| **Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto:**<br>Departamento de Química Orgánica, Universidad Autónoma de Madrid | |
| **Teléfono directo: 914973399** | **e-mail: salome.rodriguez@uam.es** |


## DATOS DEL PROYECTO

**Título: Diseño y síntesis de nuevos aceptores tridimensionales basados en subporfirazinas para su aplicación en células solares orgánicas**

**Breve descripción de los objetivos, contenido del proyecto y tareas a realizar**

El uso de semiconductores orgánicos en células fotovoltaicas ofrece la ventaja de proporcionar materiales ligeros, procesables en disolución y flexibles. Comparado con la gran cantidad disponible de materiales dadores, existe muy poca variedad de materiales aceptores verdaderamente eficientes. En los últimos años, los derivados de fullereno tales como $PC_{61}BM$ y $PC_{71}BM$ han constituido las moléculas aceptoras dominantes por excelencia. Sin embargo, su débil absorción en la zona del visible, la dificultad para modificarlos estructuralmente y su alto coste limitan sus aplicaciones. Por ello, en los últimos años son varios los grupos de investigación que están explorando el diseño y síntesis de nuevos aceptores de tipo no fullereno. Debido a su estructura tridimensional que permite su organización supramolecular, además de su sistema π extendido, las Subftalocianinas (SubPcs) y Subnaftalocianinas (SubNcs)[1] (Figura 1) representan moléculas prometedoras para fotovoltaica molecular, comparables a las estructuras 3D de los fullerenos. En particular, se han descrito células solares basadas en SubNcs con eficiencias de conversión (PCE)del 8.40%.[2]

Las **subporfirazinas** (SubPzs, Figura 1)[3] son porfirinoides sintéticos formados por tres anillos de pirrol unidos a través de las posiciones 2 y 5 mediante puentes aza. Al igual que las SubPcs y las SubNcs, las SubPzs pertenecen al grupo de los porfirinoides tripirrólicos,[1] que se caracterizan por tener una estructura aromática cónica, que contiene un circuito de 14 electrones π. Además, estos compuestos sólo se conocen como complejos de boro, el cual se coordina a los nitrógenos de la cavidad central.

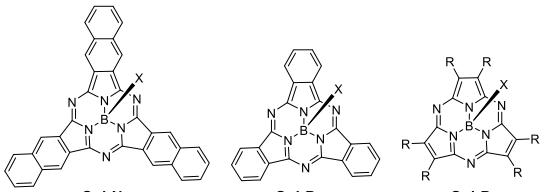



**Fig. 1**. Estructuras de Subporfirinoides

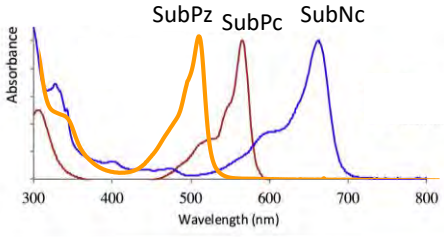



**Fig. 2**. Espectros UV/Vis de SubPzs, SubPcs y SubNcs

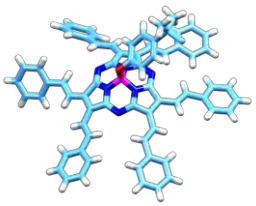


**Fig. 3.** Estructura de RX de una hexavinileno-SubPz

Los espectros de absorción de las SubPzs, las SubPcs y las SubNcs están dominados por bandas Q muy intensas a 500-640 nm (Figura 2). Estas diferencias en la posición de las bandas Q se deben a la extensión de la conjugación a través de los anillos de benceno fusionados en las SubPcs y las SubNcs.[4] La funcionalización de estos macrociclos con sustituyentes adecuados en sus posiciones periféricas permite modular sus propiedades ópticas y desplazar sus bandas de absorción. En este sentido, la sustitución periférica tiene una influencia mucho más fuerte en las características electrónicas de las SubPzs que en las de los SubPcs y SubNcs, puesto que en las primeras los sustituyentes periféricos están directamente unidos al núcleo del macrociclo, mientras que en las segundas y terceras están unidos a través de los anillos de benceno y naftaleno fusionados, respectivamente.[5] En nuestro grupo hemos desarrollado una metodología para la síntesis de SubPzs sustituidas en la periferia con grupos arilo y vinileno, que nos ha permitido el diseño a medida de una variedad de estos cromóforos con propiedades ópticas y redox "a la carta".[5,6,7] En particular, en los derivados de hexavinileno-SubPzs, las unidades de vinileno adoptan una disposición coplanar (Figura 3) con respecto al macrociclo aromático, resultando en un sistema π con conjugación extendida, que preserva la versatilidad única del anillo de SubPz. Así, se puede dotar a las SubPzs de propiedades dadoras o aceptoras, entre otras, mediante

la funcionalización en los extremos vinileno con grupos funcionales adecuados, cuyas propiedades electrónicas se trasmitirán de manera eficiente a los macrociclos a través de los conectores vinileno.[5,6,7]

**Objetivos del proyecto**

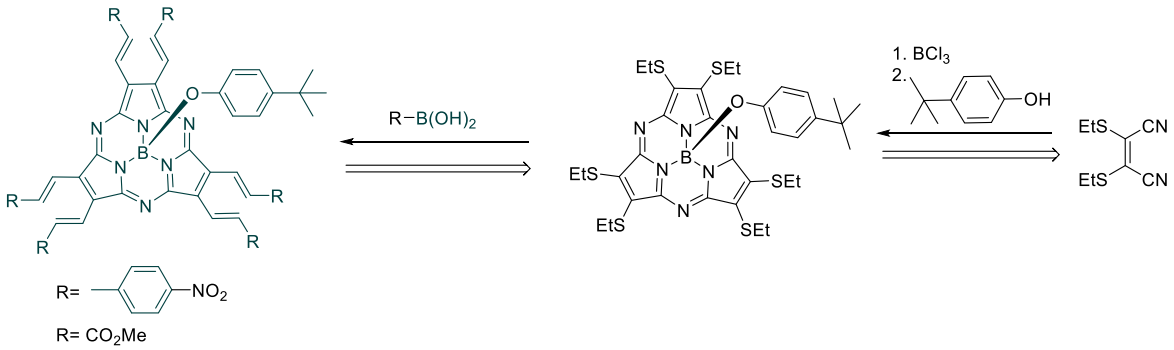
***El objetivo principal de este proyecto es el diseño y preparación de nuevos cromóforos de tipo Subporfirazina con conjugación extendida, y el estudio de sus propiedades fotofísicas y fotoquímicas, en particular, sus propiedades aceptoras y organización en el estado cristalino.*** En concreto, se pretende obtener Subporfirazinas con absorciones en la región del rojo, con fuertes propiedades aceptoras de electrones, comparables o superiores a las de los derivados de fullereno, gran solubilidad en disolventes orgánicos y gran capacidad para autoorganizarse. En el Esquema 1, abajo, se muestran como ejemplo dos estructuras de Subporfirazinas funcionalizadas con seis unidades de vinileno, y dotadas en los extremos con grupos fuertemente atractores de electrones, como son los derivados de ácido carboxílico y los grupos nitro.

**Metodología y Plan de trabajo**

Se acometerá la preparación de estos macrociclos mediante reacciones de acoplamiento catalizadas por paladio de tipo Liebeskind Srogl, entre ácidos borónicos adecuadamente funcionalizados con unidades atractoras de electrones, y derivados de subporfirazina hexafuncionalizadas con grupos tioéter. El plan de trabajo consta de tres fases que se resumen a continuación:

**1.** Siguiendo la metodología desarrollada en el grupo, se preparará un precursor SubPz conteniendo seis unidades de tioéter directamente unidos a su periferia, mediante reacciones de reacciones de ciclotrimerización de los correspondientes derivados de maleonitrilo, asistidas por $BCl_3$. En una segunda etapa se introducirá el sustituyente en la posición axial mediante tratamiento con terc-butilfenol.[5,6] Asimismo, se prepararán los derivados de ácido borónico conteniendo grupos atractores como los representados en el Esquema 1, utilizando los procedimientos descritos en la literatura, mediante reacciones de hidroboración de los correspondientes alquinos con catecolborano, seguidas de hidrólisis.[8]

**2.** Se introducirán los grupos vinileno atractores de electrones en la periferia del anillo de SubPz utilizando reacciones de formación de enlaces C-C de tipo Liebeskind Srogl entre la SubPz precursora y los derivados de ácido borónico preparados en el apartado anterior (véase Esquema 1),[8] de acuerdo con los protocolos desarrollados previamente en el grupo.




**Esquema 3**

**3.** Se estudiarán las propiedades ópticas y redox de los nuevos derivados preparados mediante espectroscopía de UV-Vis y fluorescencia, así como ciclovoltametría cíclica. Cabe esperar para estos macrociclos bandas de absorción desplazadas hacia la región del rojo y bajos potenciales de reducción.

**Referencias**


1. C. G. Claessens, D. González-Rodríguez, M. S. Rodríguez-Morgade, A. Medina, and T. Torres, *Chem. Rev.,* **2014**, *114,* 2192.
2. J. D. Dang, D. S. Josey, M. T. Dang, T. P. Bender, *ACS Omega* **2018**, 3, 2093.
3. M. S. Rodríguez-Morgade, S. Esperanza, T. Torres, and J. Barberá, *Chem. Eur. J.,* **2005**, *11*, 354.
4. Y. Rio, M. S. Rodríguez-Morgade, and T. Torres, *Org. Biomol. Chem.,* **2008**, *6,* 1877.
5. E. Caballero, D. Guzmán, T. Torres, M. S. Rodríguez-Morgade, *J. Org. Chem.* **2020**, *85*, 1948.
6. T. Higashino, M. S. Rodríguez-Morgade, A. Osuka and T. Torres, *Chem. Eur. J*, **2013**, *19*, 10353.
7. D. Guzmán, I. Papadopoulos, G. Lavarda, P. R. Rami, R. R. Tykwinski, M. S. Rodríguez-Morgade, D. M. Guldi and T. Torres, *Angew.Chem. Int. Ed.* **2021**, *60*,1474.
8. Q. I. Churches, H. E. Stewart, S. B. Cohen, A. Shröder, P. Turner, C. A. Hutton, *Pure Appl. Chem.* **2008**, 80, 687.


**Capacidades y conocimientos recomendables que debe tener el estudiante para la realización de este proyecto**

Experiencia en síntesis orgánica

**Indíquese cualquier otra aclaración que se considere que pueda ayudar a los estudiantes en la elección del TFM**

Fecha: 19 de Julio de 2021

Firma de los directores del proyecto:

MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGÁNICA

# PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2021-2022

## DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE


| | |
|---|---|
| **Apellidos y nombre del director(es) del proyecto:**<br>**MARTINEZ DIAZ, M. VICTORIA** | |
| **Cargo: PROFESOR TITULAR** | |
| **Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto: QUIMICA ORGANICA, UAM** | |
| **Teléfono directo**<br>**914972436** | **e-mail**<br>victoria.martinez@uam.es |


## DATOS DEL PROYECTO

**Título: SUBFTALOCIANINAS CON CONJUGACION EXTENDIDA PARA APLICACIONES EN CÉLULAS SOLARES**

**Breve descripción de los objetivos, contenido del proyecto y tareas a realizar**

El descubrimiento de alótropos de carbono curvos, fullerenos y nanotubos de carbono y sus relevantes propiedades, ha impulsado en los últimos años el desarrollo de métodos de síntesis de *compuestos aromáticos policíclicos no planos.* Cabe destacar la investigación desarrollada sobre coranuleno y helicenos, entre otros hidrocarburos aromáticos policíclicos. La geometría curva de estas moléculas modifica no solo sus propiedades ópticas, sino las electrónicas, implicando cambios en las propiedades redox y de transporte de carga.

Las Subftalocianinas (SubPcs, **1**) son macrociclos aromáticos que presentan una estructura cóncava muy peculiar, como consecuencia de la coordinación tetraédrica del átomo de boro localizado en su cavidad central a los nitrógenos de las tres unidades de diiminoisoindol que los constituyen. Adecuadamente sustituidas en la periferia son moléculas quirales, configuracionalmente estables, dada su alta barrera de inversión. Son moléculas con de gran interés para distintas aplicaciones tecnológicas, entre las que destacan los *dispositivos fotovoltaicos orgánicos*. Para ello, es importante que presenten una absorción lo más desplazada posible hacia el rojo (alrededor de 650-700 nm), para lo que se requiere expandir la conjugación del macrociclo fusionando anillos de benceno o recurriendo a los dímeros fusionados de SubPc (**2**).

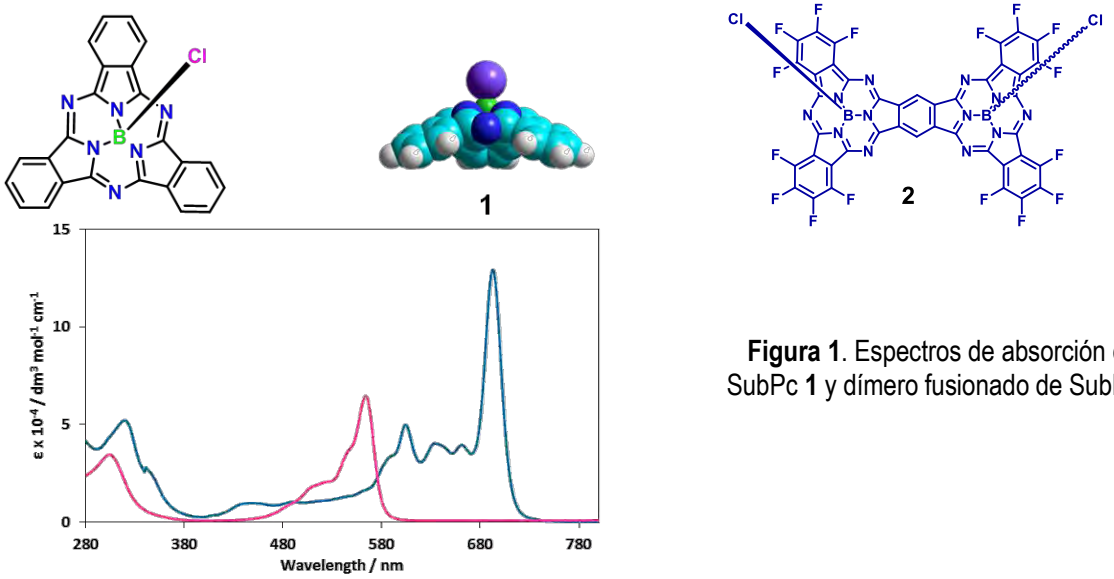
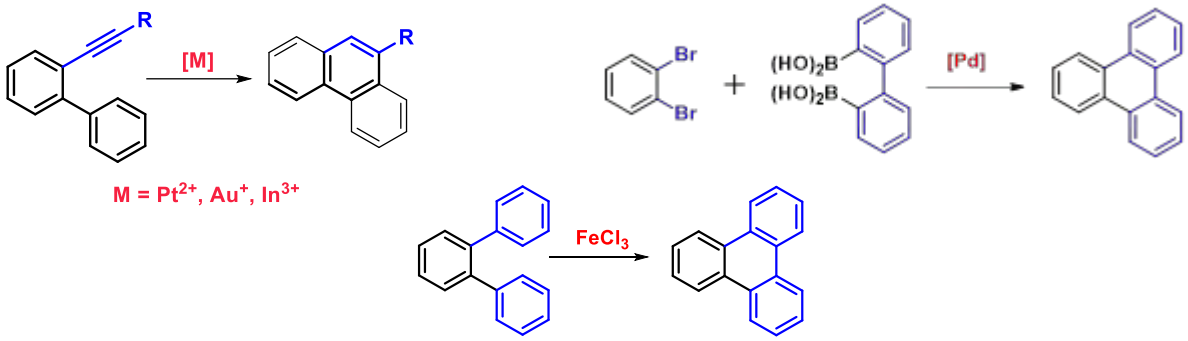
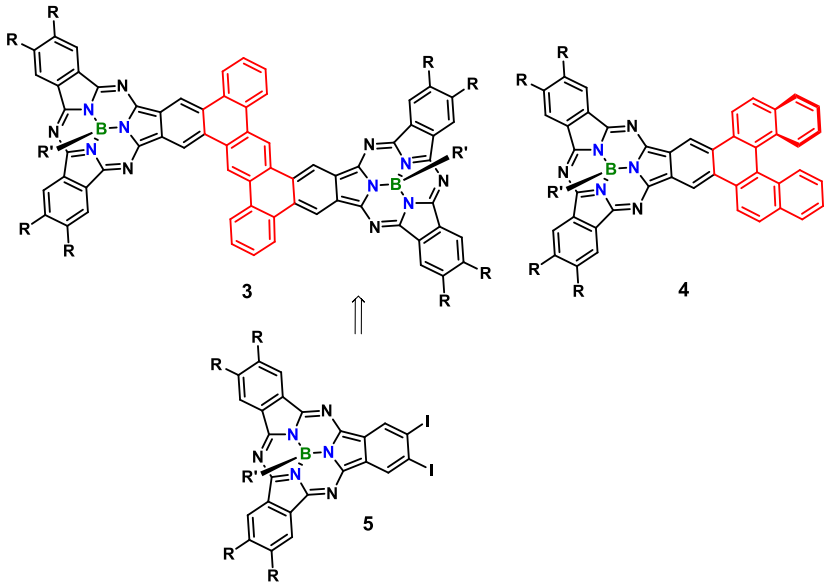



**Figura 1**. Espectros de absorción de SubPc **1** y dímero fusionado de SubPc **2**

Sin embargo, la metodología descrita para sintetizar estos derivados de SubPc fusionados con conjugación π-extendida presenta muchos inconvenientes y bajos rendimientos, por lo que el objetivo de este trabajo consistirá en estudiar **nuevos métodos de síntesis de derivados de SubPc con conjugación extendida** utilizando metodologías sintéticas basadas en **reacciones de anulación** como las representadas en los siguientes esquemas de reacción:




Este tipo de metodologías podría aplicarse, por ejemplo, a la preparación de dímeros fusionados de SubPc como **3,** con una fuerte absorción en el rojo, y por tanto con interesantes características para ser incorporado en dispositivos fotovoltaicos. También se plantea la preparación de derivados Subftalocianinicos fusionados a distintos hidrocarburos policiclicos aromáticos como trifenileno, etc…pudiendo obtener derivados helicénicos quirales como **4**, cuya síntesis enantioselectiva pretende ser abordada.




Aunque el trabajo es principalmente sintético, tiene un enfoque aplicado, ya que los colorantes con conjugación extendida presentan un gran interés en diversas áreas, entre las que destacan las aplicaciones en fotovoltaica molecular y en terapia fotodinámica.
Se realizará por tanto una detallada caracterización de las moléculas preparadas por técnicas espectroscópicas, voltametría cíclica, etc.

**Capacidades y conocimientos recomendables que debe tener el estudiante para la realización de este proyecto**
Se requiere un(a) estudiante motivado(a) con buenos conocimientos de química orgánica sintética y elucidación estructural, e interés por áreas interdisciplinares relacionadas con la Nanociencia.

MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGÁNICA

# PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL 2021-22 (PROYECTO + TFM)

## DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE


| | |
|---|---|
| **Apellidos y nombre del director(es) del proyecto: Maria Ribagorda y Silvia Simón** | |
| **Cargo: Profesora Titular y Estudiante predoctoral** | |
| **Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto: Dpto Química Orgánica, Universidad Autónoma de Madrid, Facultad de Ciencias, Departamento de Química Orgánica, Módulo 1, Laboratorio 206-203** | |
| **Teléfono directo 914972934** | **e-mail** maria.ribagorda@uam.es, silvia.simon@uam.es |


## DATOS DEL PROYECTO

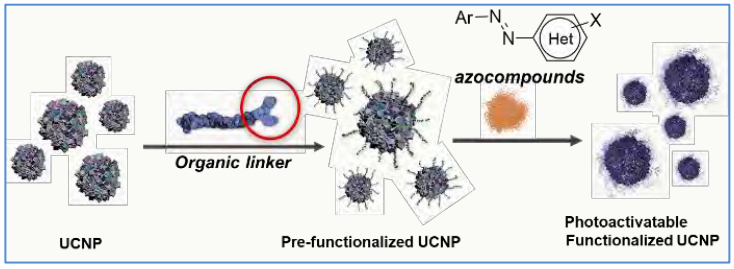
**Título: Preparación de sensores de hipoxia basados en azobencenos.**

**Breve descripción de los objetivos, contenido del proyecto y tareas a realizar**

El desarrollo de metodologías de diagnosis, más precisas y selectivas, que proporcionen un rápido diagnóstico de una enfermedad es una de las herramientas más poderosas en la medicina general. ***Este trabajo fin de máster se centra en la síntesis de sensores orgánicos fluorescentes de hipoxia, basados en estructuras de azobencenos para su futuro anclaje a nanopartículas de emisión ascentente (upconversion nanoparticles, UCNP)***.

La hipoxia es una condición asociada a niveles bajos de oxígeno en tejidos biológicos o células, siendo un fenómeno relacionado con procesos inflamatorios, así como a enfermedades tales como cáncer o isquemia aguda.

Los azocompuestos se han empleado como sensores fluorescentes de hipoxia, ya que son capaces de inhibir la fluorescencia de fluoróforos orgánicos en condiciones de oxígeno normales (normoxia), pero bajo hipoxia se produce la ruptura del enlace N=N recuperando la fluorescencia del sistema. Las UCNP son nanopartículas dopadas con lantánidos que emiten luz visible tras su excitación con infrarrojo cercano. Las UCNP tienen tres propiedades muy importantes: *1) se excitan con luz en el rango de la primera ventana biológica (650–950 nm), donde hay una mayor penetrabilidad de la luz en los tejidos; 2) poseen emisiones anti-Stokes (en el rango del UV/vis) que pueden ser aprovechadas para la excitación indirecta de moléculas orgánicas y 3) las UCNP poseen emisiones en la segunda ventana biológica (1000-1350 nm) pudiendo ver su emisión evitando problemas de autofluorescencia*. Estas propiedades les ha situado como una de las herramientas más prometedoras en bioimagen tanto in vitro e in vivo. La síntesis de los azocompuestos se llevará a cabo utilizando diferentes estrategias sintéticas puestas a punto en el grupo de investigación, que permitan a continuación su anclaje a las nanopartículas. El anclaje a la nanopartícula se llevará a cabo a través de un espaciador orgánico, que permite de forma rápida y limpia anclar el compuesto orgánico a la nanopartícula. Las UCNPs se prepararán en el Grupo FIG (Prof.Daniel Jaque) del Departamento de Física de Materiales de la UAM y en colaboración con el Prof. Francisco Sanz del Dpto. de biología celular (UAM) se llevará a cabo el estudio de sus propiedades como sondas fluorescentes de medios biológicos.




**Capacidades y conocimientos recomendables que debe tener el estudiante para la realización de este proyecto**

Grado en Química; Trabajo fin de grado en Química Orgánica. Determinación Estructural.

**Indíquese cualquier otra aclaración que se considere que pueda ayudar a los estudiantes en la elección del TFM**

El trabajo que se incluye en este proyecto de investigación supone un estudio metodológico centrado en el área de la síntesis orgánica. Las reacciones que se desarrollarán están en línea con los últimos avances en síntesis orgánica, lo que permitirá al estudiante adquirir una amplia formación en áreas punteras de la química. En nuestro grupo de investigación se desarrolla principalmente la parte de síntesis y caracterización de los compuestos orgánicos. A nivel técnico los estudiantes de máster recibirán formación en técnicas de resonancia magnética de protón, carbono y fluor, técnicas de UV/Visible y fluorescencia, técnicas cromatográficas HPLC, GS, GS-Masas, así como en las técnicas habituales de síntesis orgánica y otras técnicas que fueran necesarias para la realización del proyecto. En este sentido, este proyecto cuenta con la colaboración de dos profesores de física de Materiales (encargados de la preparación de las nanopartículas y sus medidas fotofísicas) y un biólogo celular (encargado de las pruebas biológicas). Los estudiantes de máster participarán en todos estos estudios fotofísicos y biológicos con el fin de completar su formación .

MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGÁNICA

# PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2021-2022

## DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE

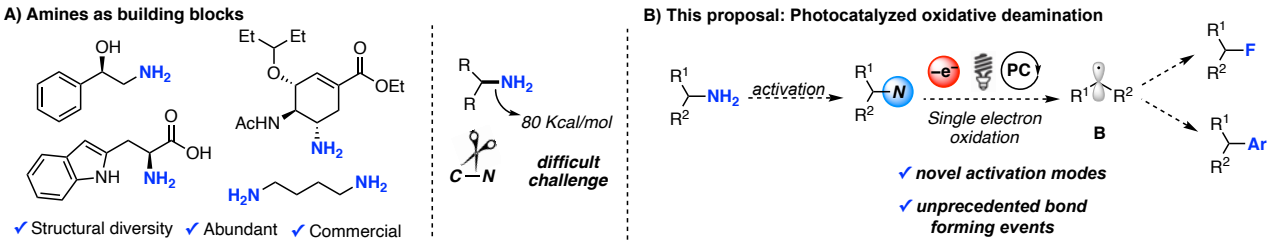

| | |
|---|---|
| **Apellidos y nombre del director(es) del proyecto: Mariola Tortosa Manzanares** | |
| **Cargo: Profesor Contratado Doctor** | |
| **Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto:** Química Orgánica, Facultas de Ciencias, Universidad Autónoma de Madrid | |
| **Teléfono directo** **914974269** | **e-mail** mariola.tortosa@uam.es |


## DATOS DEL PROYECTO

**Título: Novel catalytic methods for the selective cleavage of carbon-nitrogen bonds**

**Breve descripción de los objetivos, contenido del proyecto y tareas a realizar**

El grupo funcional amina está presente en multitud de moléculas orgánicas, desde productos naturales y fármacos, hasta polímeros y biomoléculas. Adicionalmente, el elevado número de aminas disponibles comercialmente hace que sean compuestos muy accesibles. Por ello, las aminas serían "**bloques de construcción**" (building blocks) muy atractivos para la preparación de moléculas más complejas si tuviésemos al alcance métodos selectivos para romper el enlace carbono nitrógeno e introducir en su lugar otros grupos funcionales. Sin embargo, la ruptura selectiva de enlaces carbono-nitrógeno es un reto difícil, principalmente debido a la elevada energía de disociación de este enlace, y a la tendencia de los grupos amino para actúar como ligandos promoviendo la desactivación de procesos catalíticos.




Dentro del marco del proyecto europeo ERC-Consolidator "Selective Pathways for Carbon-Nitrogen Bond Cleavage" (SCAN) nos proponemos desarrollar nuevas reacciones catalíticas que permitan transformar aminas en una amplia variedad de grupos funcionales, mediante la ruptura selectiva del enlace carbono-nitrógeno. Nuestra estrategia consiste en la transformación de aminas primarias en derivados (activation) especialmente diseñados para participar en procesos de oxidación monoelectrónica promovidos por un fotocatalizador en presencia de luz visible. En este proceso de transferencia monoelectrónica se pretende promover la ruptura homolítica del enlace carbono-nitrógeno para generar así un radical carbonado. Una vez formado, el radical carbonado podrá participar en distintas reacciones de formación de enlaces carbono-carbono o carbono-heteroátomo. En este trabajo de fin de Máster nos proponemos explorar esta aproximación para diseñar reacciones de fluoración y/o de arilación.

**Capacidades y conocimientos recomendables que debe tener el estudiante para la realización de este proyecto**

El estudiante debe tener un claro interés por la síntesis orgánica y por la catálisis. Es recomendable haber trabajado previamente en un laboratorio de química orgánica.

**Indíquese cualquier otra aclaración que se considere que pueda ayudar a los estudiantes en la elección del TFM**

El estudiante afianzará y ampliará sus conocimientos en Química Orgánica. Realizará búsquedas bibliográficas relacionadas con el tema de investigación, se enfrentará a reacciones químicas muy variadas y aprenderá a trabajar en condiciones de atmosfera inerte. Adicionalmente, se familiarizará con las técnicas básicas para trabajar en un laboratorio de química orgánica incluyendo el uso de Resonancia Magnética Nuclear, HPLC, GC/MS y caja seca.

El trabajo se desarrollará en el laboratorio L-105 del módulo 01. Para más información sobre nuestro grupo de investigación ver, www.tortosagroup.com. Para más información sobre el proyecto escribir a mariola.tortosa@uam.es.

MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGÁNICA

# PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2021-2022

## DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE


**Apellidos y nombre del director(es) del proyecto: Mariola Tortosa Manzanares**

**Cargo: Profesor Contratado Doctor**

**Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto:**
Química Orgánica, Facultas de Ciencias, Universidad Autónoma de Madrid

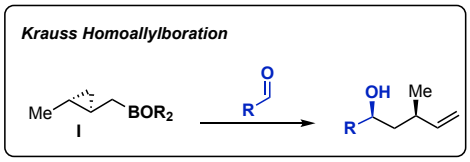
| **Teléfono directo** | **e-mail** |
|---|---|
| **914974269** | mariola.tortosa@uam.es |

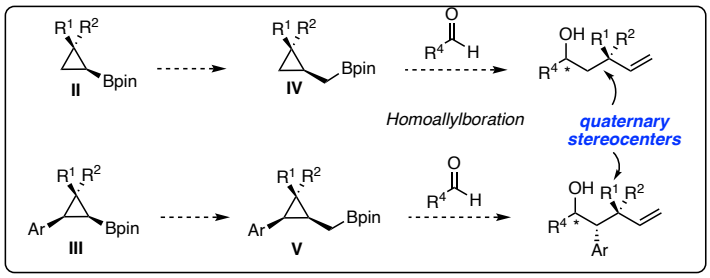

## DATOS DEL PROYECTO

**Título: Synthesis and reactivity of novel homoallylboration reagents**

**Breve descripción de los objetivos, contenido del proyecto y tareas a realizar**

Las reacciónes de alilación y crotilación de aldehídos utilizando boranos y boronatos alílicos son una de las herramientas más potentes para la preparación de alcoholes alílicos, intermedios muy utilizados en la síntesis de productos biológicamente activos. Esta transformación transcurre a través de estados de transición muy ordenados (Zimmerman−Traxler) que permiten obtener los productos con elevado estereocontrol. Hace unos años, Kraus desarrolló la reacción de homoalilación de aldehídos utilizando ciclopropil boronatos **I** en vez de boronatos alílicos. Esta reactividad tan interesante sólo se exploró con ciclopropil boronatos sencillos, debido a la dificultad para preparar derivados más funcionalizados de forma estereocontrolada.
En nuestro grupo de investigación hemos desarrollado distintos métodos para obtener ciclopropilboronatos enantioméricamente enriquecidos **II** y **III** que contienen un centro cuaternario en su estructura.[2] Estos derivados se pueden transformar fácilmente en los ésteres borónicos **IV** y **V** mediante una reacción de homologación de Mattesson. En este trabajo de fin de Máster, queremos aprovechar estos intermedios para explorar con ellos la reacción de homoalilación de aldehídos. Los productos esperados son alcoholes homoalílicos enantioenriquecidos que contienen un centro cuaternario en su estructura, difíciles de preparar mediante métodos conocidos.





(1) Lin, H.; Pei, W.; Wnag, H.; Houk, K. N.; Krauss, I. J. *J. Am. Chem. Soc.* **2013**, *135*, 82.
(2) Parra, A.; Amenós, L.; Guisan-Ceinos M.; López, A.; Garcia-Ruano, J. L.; Tortosa, M. *J. Am. Chem. Soc*. **2014**, *136*, 15833.


**Capacidades y conocimientos recomendables que debe tener el estudiante para la realización de este proyecto**
El estudiante debe tener un claro interés por la síntesis orgánica y por la catálisis. Es recomendable haber trabajado previamente en un laboratorio de química orgánica.

**Indíquese cualquier otra aclaración que se considere que pueda ayudar a los estudiantes en la elección del TFM**
El estudiante afianzará y ampliará sus conocimientos en Química Orgánica. Realizará búsquedas bibliográficas relacionadas con el tema de investigación, se enfrentará a reacciones químicas muy variadas y aprenderá a trabajar en condiciones de atmosfera

inerte. Adicionalmente, se familiarizará con las técnicas básicas para trabajar en un laboratorio de química orgánica incluyendo el uso de Resonancia Magnética Nuclear, HPLC, GC/MS y caja seca.
El trabajo se desarrollará en el laboratorio L-105 del módulo 01. Para más información sobre nuestro grupo de investigación ver, www.tortosagroup.com. Para más información sobre el proyecto escribir a mariola.tortosa@uam.es.

MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGÁNICA

# PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL 2021-22 (TFM)

## DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE


**Apellidos y nombre del director(es) del proyecto:** Alemán Lara, José Julián; Blanco Fernández, Matías

**Cargo:** Profesor Titular, Investigador postdoctoral Juan de la Cierva

**Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto:**

Departamento de Química Orgánica, Facultad de Ciencias, Universidad Autónoma de Madrid

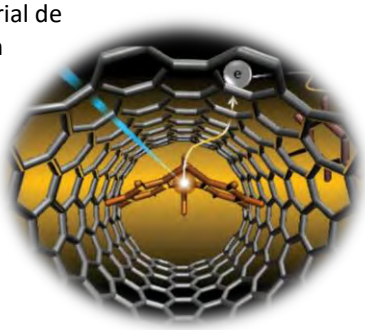
| **Teléfono directo:** 91 497 5022 | **e-mail:** jose.aleman@uam.es; matias.blanco@uam.es |
|---|---|


## DATOS DEL PROYECTO

**Título:** Desarrollo de nuevos procesos carbocatalíticos para la síntesis de Compuestos Biológicamente Activos

**Breve descripción de los objetivos, contenido del proyecto y tareas a realizar:**

El área de la carbocatálisis está centrada en reacciones que utilizan como catalizador un material de carbono. En los últimos años gran parte de esta investigación se ha centrado en la sustitución de tradicionales sistemas metálicos o bien condiciones de reacción muy agresivas por el empleo de materiales de carbono, permitiendo la realización de dichos procesos de una manera mucho más suave y respetuosa con el medio ambiente. Así, numerosos ejemplos se encuentran en la bibliografía donde materiales de carbono catalizan reacciones redox, condensaciones aldólicas o de Knoevenagel entre otras. Asimismo, el desarrollo de estos procesos carbocatalíticos usando nanomateriales de carbono, como nanotubos o grafeno, ha cobrado un gran interés ya que sus propiedades increíbles que surgen de la nanoescala se pueden correlacionar con la actividad catalítica.



El objetivo de este proyecto será el desarrollo de nuevos procesos catalíticos utilizando diferentes nanomateriales de carbono (nanotubos, grafeno) para la síntesis de compuestos potencialmente bioactivos de tipo indol de una forma más segura, eficaz y responsable con el medio ambiente (véase, la web del grupo. www.uam.es/jose.aleman). En este trabajo se estudiará tanto la síntesis de los materiales y su caracterización fisicoquímica, así como la actividad en reacciones carbocatalizadas.

Las tareas a realizar en el presente TFM proveerán al alumno de nuevas capacidades y conocimientos en el área de Química en general y Química Orgánica en particular, ampliando su experiencia tanto en el trabajo experimental del laboratorio (manejo de material, montajes de reacciones complejas, nuevas técnicas de purificación y caracterización de compuestos, etc) como en el planteamiento de posibles mecanismos de reacción, en búsquedas bibliográficas y exposición y escritura de trabajos científicos.

**Capacidades y conocimientos recomendables que debe tener el estudiante para la realización de este proyecto**

Recomendable haber cursado las asignaturas de Ampliación en Química Orgánica (3er curso), Determinación Estructural (4º curso) y haber realizado el TFG en Química Orgánica.

**Indíquese cualquier otra aclaración que se considere que pueda ayudar a los estudiantes en la elección del TFM**

El alumno podrá compatibilizar el desarrollo del proyecto con el curso normal del resto de las asignaturas en que se encuentre matriculado en el Máster.

Fecha: 24/07/2021

Firma de los directores del proyecto:

MASTERQO
MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGÁNICA

# PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL 2020-21 (TFM)

## DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE


| | |
|---|---|
| **Apellidos y nombre del director(es) del proyecto:** Ramón Gómez Arrayás / Pablo Mauleón Pérez | |
| **Cargo:** Profesor Titular de Universidad / Profesor Contratado Doctor | |
| **Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto:** Universidad Autónoma de Madrid, Facultad de Ciencias, Departamento de Química Orgánica (módulo 01, laboratorio 408) | |
| **Teléfono directo:** 91 497 2772 / 2208 | **e-mail:** ramon.gomez@uam.es / pablo.mauleon@uam.es |


## DATOS DEL PROYECTO

**Título: Desarrollo de procesos multicatalíticos para la difuncionalización de alquinos**

**Breve descripción de los objetivos, contenido del proyecto y tareas a realizar**

**1. Área de conocimiento en que se enmarca:**

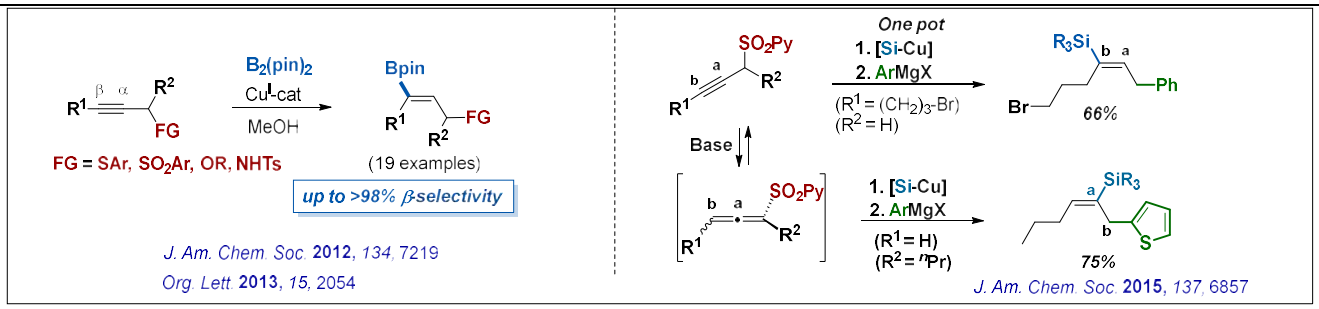
Dentro del área general de la Química Orgánica, el estudiante recibirá formación de carácter **multidisciplinar** adquirirá conocimientos en procedimientos experimentales en Síntesis Orgánica, catálisis y Química Organometálica. Estos incidirán en las técnicas de preparación, purificación y caracterización de sustratos generales obtenidas durante la carrera, que se ampliarán para incluir técnicas más avanzadas de espectroscopía, espectrometría o la difracción de rayos X. Así mismo, se iniciará al estudiante en técnicas más avanzadas propias de un laboratorio de Química Organometálica, como el aislamiento e identificación de intermedios de reacción necesarios para la elucidación de mecanismos de reacción.

A lo largo de la duración del proyecto se hará especial énfasis en la **racionalización** de resultados experimentales, el **diseño lógico** de experimentos a realizar y la **formulación de hipótesis** mecanísticas para explicar los datos obtenidos. Una parte importante de la formación a adquirir por el estudiante se orientará hacia el trabajo de **documentación bibliográfica** de la reacción a investigar, el manejo de bases de datos, de software específico de esta disciplina y de herramientas de búsqueda *on-line*, de especial importancia en un laboratorio de investigación moderno.

**2. Objetivos**

La mayoría de los métodos de funcionalización regioselectiva de alquenos o alquinos se emplean sustratos convenientemente funcionalizados que favorecen la obtención de un único regioisómero del producto debido al sesgo estérico o electrónico impuesto por una determinada agrupación funcional. En estos casos, el acceso al regioisómero opuesto típicamente no puede lograrse sin una laboriosa modificación del sustrato. Frente a estas estrategias, *la capacidad de invertir el curso regioquímico de la reacción sin necesidad de modificar el sustrato, es decir, el desarrollo de procesos catalíticos estereoselectivos y* ***regiodivergentes*** *que permitan acceder a los dos posibles regioisómeros de un producto a partir de un mismo sustrato de partida está al alcance de muy pocos sistemas catalíticos y constituye un importante desafío en catálsis*. Por otra parte, otra importante limitación surge el hecho de que generalmente la estereoselectividad de la reacción está dictada por la adición *syn* del alquino sobre el enlace R–M. Por esta razón, *el desarrollo de métodos* ***estereodivergentes*** *que permitan el acceso directo a los dos posibles estereoisómeros sin necesidad de modificar el sustrato de partida presenta un exraordinario interés*.

Dentro de este contexto, nuestro grupo investigador ha desarrollado el primer método general de borilación regioselectiva de alquinos internos dialquílicos no simétricos. La estrategia se basa en la instalación en la posición propargílica de un grupo 2-piridilsulfonilo ($SO_2Py$) que ejerce como grupo director y que puede ser fácilmente eliminado o bien derivatizarse posteriormente (*J. Am. Chem. Soc.* **2012**, *134*, 7219; *Org. Lett*. **2013**, *15*, 2054). Además, la naturaleza sulfona de dicho grupo permite promover una fácil isomerización de propargil- a alenilsulfonas en presencia de una base adecuada. Utilizando esta estrategia, hemos conseguido el desarrollo de un método **regiodivergente** de sililación que proporciona acceso controlado y selectivo los dos posibles regioisómeros sililados del alquino (*J. Am. Chem. Soc.* **2015**, *137*, 6857).




Más recientemente, hemos trasladado este concepto del control de la selectividad a procesos de funcionalización diferentes catalizados por otros metales de transición. Así, hemos logrado la hidroarilación regiocontrolada catalizada por Pd de alquinos internos no simétricos con ácidos arilborónicos (véase esquema a continuación). Adicionalmente, aprovechando la naturaleza estirénica de los productos obtenidos, hemos acoplado el proceso de hidroarilación catalizada por Pd a un proceso de fotoisomerización contratermodinámica E→Z en presencia de luz visible y un fotocatalizador de Ir. Puesto que ambos sistemas catalíticos son capaces de operar simultáneamente mediante un proceso tándem, el método permite la hidroarilación regioselectiva (control por el grupo $SO_2Py$) y **estereodivergente** de alquinos internos no simétricos (*ACS Catal*. **2019**, *9*, 10567; *Org. Lett*. **2020**, *22*, 6473).

El presente proyecto de TFM plantea desarrollar nuevos procesos de funcionalización de alquinos mediante el desarrollo de procesos multicatalíticos, en los cuales varios catalizadores presentes en el medio de reacción operen de manera simultánea y selectiva. El objetivo final es obtener no sólo regio- y estereocontrol, sino también la posibilidad de variar a voluntad la selectividad de la reacción para obtener distintos patrones de sustitución a partir de un único producto inicial. Igualmente, la combinación de sistemas catalíticos que operan en tándem ofrece la posibilidad de descubrir nuevos tipos de reactividad (Chem 2021, https://doi.org/10.1016/j.chempr.2021.06.002).

**Capacidades y conocimientos recomendables que debe tener el estudiante para la realización de este proyecto**

Todos los aspectos en los que recibirá formación el estudiante están en relación directa con las materias básicas de Química Orgánica de la Licenciatura en Química, en particular con las asignaturas troncales *Química Orgánica* (2º curso) y *Ampliación de Química Orgánica* (3º curso), *Determinación Estructural* (4º curso) y *Experimentación Avanzada* (curso 4º). Dado el carácter multidisciplinar del proyecto, también se hará énfasis en aspectos de *Química Inorgánica*, tanto de 2º como de 3º curso.

**Indíquese cualquier otra aclaración que se considere que pueda ayudar a los estudiantes en la elección del TFM**

Fecha: 15-07-2021

Firma de los directores del proyecto:

**Ramón Gómez Arrayás** **Pablo Mauleón Pérez**

# PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL 2021-22 (TFM)

## DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE


**Apellidos y nombre del director(es) del proyecto:** Pablo Mauleón Pérez/Ramón Gómez Arrayás

**Cargo:** Profesor Contratado Doctor / Profesor Titular

**Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto:**

Universidad Autónoma de Madrid, Facultad de Ciencias, Departamento de Química Orgánica (módulo 01, laboratorio 408)

Universidad Autónoma de Madrid, C/ Francisco Tomás y Valiente 7

Facultad de Ciencias, Departamento de Química Orgánica, Módulo 01 / Despacho 409

| **Teléfono directo** 91 497 2208/ 2772 | **e-mail** pablo.mauleon@uam.es; ramon.gomez@uam.es |
|---|---|


## DATOS DEL PROYECTO

**Título: Nuevas estrategias regio- y estereoselectivas de carbo-borilación de alquinos internos**

**Breve descripción de los objetivos, contenido del proyecto y tareas a realizar**

**1. Área de conocimiento en que se enmarca:**

Dentro del área general de la Química Orgánica, el estudiante recibirá formación de carácter **multidisciplinar** adquirirá conocimientos en procedimientos experimentales en Síntesis Orgánica, catálisis y Química Organometálica. Estos incidirán en las técnicas de preparación, purificación y caracterización de sustratos generales obtenidas durante la carrera, que se ampliarán para incluir técnicas más avanzadas de espectroscopía, espectrometría o la difracción de rayos X. Así mismo, se iniciará al estudiante en técnicas más avanzadas propias de un laboratorio de Química Organometálica, como el aislamiento e identificación de intermedios de reacción necesarios para la elucidación de mecanismos de reacción.

A lo largo de la duración del proyecto se hará especial énfasis en la **racionalización** de resultados experimentales, el **diseño lógico** de experimentos a realizar y la **formulación de hipótesis** mecanísticas para explicar los datos obtenidos. Una parte importante de la formación a adquirir por el estudiante se orientará hacia el trabajo de **documentación bibliográfica** de la reacción a investigar, el manejo de bases de datos, de software específico de esta disciplina y de herramientas de búsqueda *on-line*, de especial importancia en un laboratorio de investigación moderno.

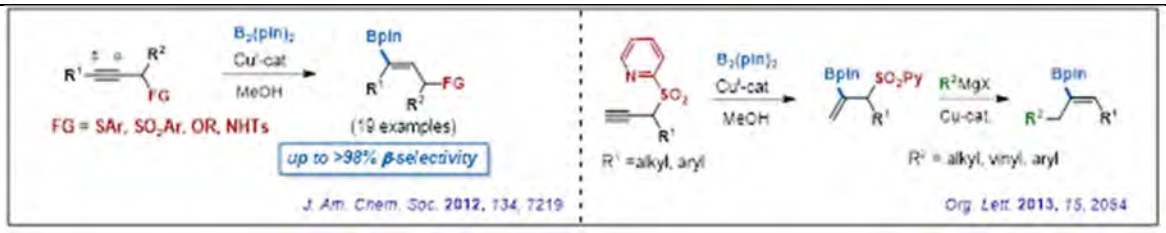
**2. Objetivos**

En los últimos años, nuestro grupo investigador ha desarrollado una intensa actividad en química catalizada por metales de transición. Muy recientemente, nuestro grupo ha descrito un método eficaz para la hidroboración enantioselectiva de aril y heteroaril vinilsulfonas utilizando catálisis de cobre.[1] Igualmente, hemos realizado importantes contribuciones en el área de la hidroboración[2] e hidrosililación[3] de alquinos. El mecanismo aceptado de la reacción de borilación y sililación catalizada por Cu implica la formación de un intermedio vinil-cobre resultante de la inserción *sin* del enlace M–Cu (M = B o Si) en el alquino. Por tanto, la captura de dicho intermedio con un electrófilo distinto de un protón proporcionaría acceso a olefinas tetrasustituidas. Aunque hay trabajos que confirman la viabilidad de esta hipótesis, esta área se encuentra aún en su infancia y ofrece numerosas posibilidades de innovación.

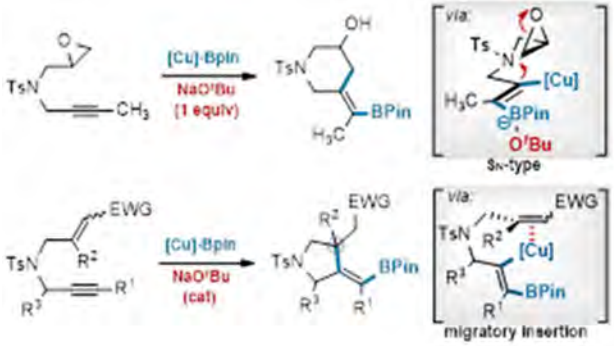
1 Moure, A. L.; Gómez-Arrayas, R.; Carretero, J.C., *Chem. Commun.* **2011**, *47*, 6701.

2 (a) Moure, A. L.; Gómez Arrayás, R.; Cárdenas, D. J.; Alonso, I.; Carretero, J. C. *J. Am. Chem. Soc.* **2012**, *134*, 7219. (b) Moure, A. L.; Mauleón, P.; Gómez Arrayás, R.; Carretero, J. C. *Org. Lett.* **2013**, *15*, 2054.

3 García-Rubia, A.; Romero-Revilla, J. A.; Mauleón, P.; Gómez Arrayás, R.; Carretero, J. C. *J. Am. Chem. Soc.* **2015**, *137*, 6857.




Tomando como punto de partida los antecedentes descritos por nuestro grupo, nuestro grupo de investigación ha aplicado muy recientemente una estrategia intramolecular para el desarrollo, basada en reacciones de borilación de sustratos estratégicamente funcionalizados con un alquino y un sistema electrófilo en la posición adecuada para interaccionar con el intermedio vinil-cobre generado tras la boril-cupración del alquino. Esta secuencia proporciona una ruta muy directa para la síntesis de derivados de pirrolidinas y piperidinas funcionalizadas en las posiciones 3 y 4 y portadoras de una olefina tetrasustituida con un elevado grado de control estereoquímico.[4]




Con estos precedentes se abre un extraordinario abanico de posibilidades para el desarrollo de estrategias de carbo-borilación de alquinos internos, especialmente en lo que respecta a ampliar el tipo de electrófilos capaces de participar en la reacción, que en la actualidad es una de las principales limitaciones de esta química. En este contexto, la presente Tesis Doctoral se centrará en el estudio de métodos de carbo-borilación regio- y estereocontrolada de alquinos utilizando una doble vía:

- La exploración de compuestos carbonílicos (aldehídos y cetonas) como nuevos electrófilos en procesos de carbo-borilación. Este objetivo lleva asociado el desarrollo de estrategias que impidan procesos asociados de desborilación de los productos finales.

- El estudio de nuevos procesos que permitan capturar eficazmente el intermedio vinil-Cu a través de mecanismos de reacción diferentes de la sustitución nucleófila convencional tipo SN2. Esto permitiría ampliar notablemente el abanico de agentes alquilantes

**Capacidades y conocimientos recomendables que debe tener el estudiante para la realización de este proyecto**

Todos los aspectos en los que recibirá formación el estudiante están en relación directa con las materias básicas de Química Orgánica del Grado en Química, en particular con las asignaturas troncales *Química Orgánica* (2º curso) y *Ampliación de Química Orgánica* (3º curso), *Determinación Estructural* (4º curso) y *Experimentación Avanzada* (curso 4º). Dado el carácter multidisciplinar del proyecto, también se hará énfasis en aspectos de *Química Inorgánica*, tanto de 2º como de 3º curso.

**Indíquese cualquier otra aclaración que se considere que pueda ayudar a los estudiantes en la elección del TFM**

Fecha: 15-07-2021

Firma de los directores del proyecto:

**Pablo Mauleón** **Ramón Gómez Arrayás**

[4] Kim-Lee, S.-H. Alonso, I.; Mauleón, P.; Gómez Arrayás, R.; Carretero, J. C. *ACS Catal*. **2018**, *8,* 8993−9005.

MASTERQO

MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGÁNICA

UAM UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE MADRID

USC UNIVERSIDADE DE SANTIAGO DE COMPOSTELA

# Máster Interuniversitario en Química Orgánica

# Relación de Trabajos de Investigación (30 ECTS) ofertados por la UCM

Curso Académico 2021-2022

| Director(es) | Título del Proyecto | Pág. |
|---|---|---|
| Aragoncillo, C. y Alonso, J.M. | Síntesis de carbazoles, bis(carbazoles) y helicenos. Estudio de sus propiedades | 1 |
| Benhamú, B. y Vázquez, H. | Síntesis y estudio fenotípico de moléculas inspiradas en metabolitos de la microbiota humana | 3 |
| Canales, M.A. | Nuevas aplicaciones de la Resonancia Magnética Nuclear para el estudio de interacciones entre biomoléculas | 4 |
| Casarrubios, L. | Síntesis de miméticos de hidrogenasa en sistemas biocompatibles | 5 |
| De la Moya, S. y Lora, B. | Emisores BODIPY de luz circularmente polarizada para aplicación en fotónica avanzada | 6 |
| De la Moya, S. y Moreno, F. | Tintes avanzados basados en BODIPY | 7 |
| Fernández, I. | Entendiendo los factores que controlan la catálisis | 8 |
| Filippone, S. | Síntesis enantioselectiva de nanoestructuras de Carbono | 9 |
| García, A. y Sánchez, F. | Síntesis orgánica de nuevos compuestos con actividad antiinflamatoria | 10 |
| García, D. | Síntesis y caracterización de nanopartículas de carbono para aplicaciones fotoquímicas avanzadas | 11 |
| Gómez, R. y García, F. | Diseño, síntesis y estudio de polímeros supramoleculares luminiscentes | 12 |
| Gómez, M. | Complejos metálicos con propiedades luminiscentes derivados de nucleobases púricas y pirimidínicas | 13 |
| Herranz, M.A. y Rodríguez, L. | Puntos de carbono para aplicaciones en biosensores | 14 |
| Illescas, B.M. y Cabrera, J. | Síntesis de fullerenos multivalentes con potenciales aplicaciones en nanomedicina | 15 |
| Luna, A. y Almendros, P. | Alenos y alquinos en la síntesis eficiente de nuevos heterociclos bioactivos | 17 |

| | | |
|---|---|---|
| Mancheño, M.J. y Ávila, D. | Síntesis y estructura de nanomateriales para su aplicación en dispositivos de almacenamiento de energía | 18 |
| Martín, N. y Fernández, J. M. | Síntesis “bottom-up” de nanografenos moleculares con propiedades optoelectrónicas | 19 |
| Martín, N. y Molina, A. | Materiales orgánicos disruptivos para el transporte de cargas en células solares híbridas basadas en perovskitas | 20 |
| Martínez, T. y Cembellín, S. | Nuevas metodologías sintéticas basadas en alenos, alquinos y heterociclos bioactivos | 21 |
| Martínez, P. y Villalonga, R. | Ensamblaje y aplicaciones de nanomateriales porosos funcionalizados con puertas moleculares | 23 |
| Ortega, S. y Martín-Fontecha, M. | Desarrollo de nuevos compuestos con propiedades bioactivas | 24 |
| Ortiz, M.J. y Rodríguez, A. | Síntesis y caracterización de nuevos colorantes orgánicos para aplicaciones biofotónicas | 25 |
| Osío, J. y Mancheño, M.J. | Diseño, síntesis y caracterización de nanomateriales<br><br>Diseño y síntesis de ligandos orgánicos tiolados para el autoensamblaje de nanopartículas de oro | 26<br><br>27 |
| Sánchez, L. y García, F. | Polimerización supramolecular de sistemas aromáticos. Mecanismos y quiralidad | 28 |
| Segura, J.L. y Ramos, M. | Síntesis de materiales orgánicos funcionales basados en unidades electroactivas | 29 |
| Segura, J.L. y Zamora, F. | Materiales orgánicos funcionales basados en redes orgánicas covalentes | 31 |
| Sierra, M.A. | Síntesis de sistemas polimetálicos miméticos de hidrogenasa para la producción eficiente de hidrógeno | 33 |

# PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2021-2022

## DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE

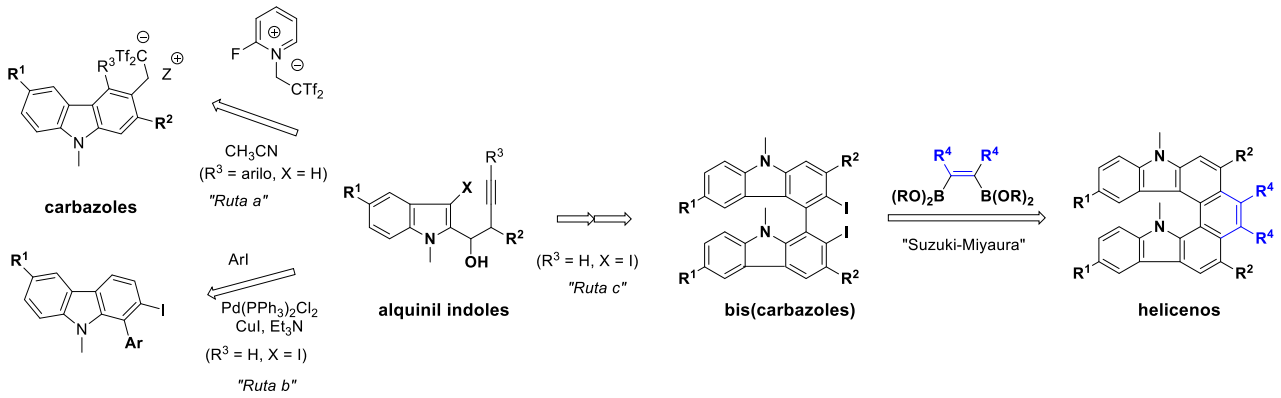

| | |
|---|---|
| **Apellidos y nombre del director(es) del proyecto:**<br>Aragoncillo Abánades, Cristina y Alonso Gómez, José Miguel | |
| **Cargo:**<br>Profesora Titular de Universidad y Profesor Ayudante Doctor | |
| **Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto:**<br>Departamento de Química Orgánica, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Complutense de Madrid | |
| **Teléfono directo**<br>**91-394-5181/91-394-5143** | **e-mail**<br>caragon@ucm.es; josalo08@ucm.es |


## DATOS DEL PROYECTO

**Título: Síntesis de carbazoles, bis(carbazoles) y helicenos. Estudio de sus propiedades**

**Breve descripción de los objetivos, contenido del proyecto y tareas a realizar**

El esqueleto de carbazol está presente en compuestos biológicamente activos. Además, se ha utilizado extensamente en dispositivos orgánicos optoelectrónicos debido a su asequibilidad, fácil funcionalización y su gran estabilidad en un rango muy amplio de condiciones. Recientemente, hemos descrito dos rutas de síntesis de carbazoles a partir de indoles funcionalizados (Esquema 1, *rutas a y b*) [*Chem. Commun*. **2020**, *56*, 1795; *Adv. Synth. Catal*. **2021**, *363*, 1449]. En este contexto, los helicenos son compuestos aromáticos policíclicos orto-condensados con una disposición angular que permite liberar su tensión de anillo. Además, su forma de hélice hace que estos compuestos tengan propiedades quiro-ópticas. Sin embargo, existen pocos ejemplos de helicenos que contengan el esqueleto de carbazol. En nuestro grupo de trabajo hemos descrito la síntesis de diazahelicenos por acoplamiento cruzado de Suzuki-Miyaura (Esquema 1, *ruta c*) [*Chem. Eur. J.* **2018**, *24*, 7620]. La síntesis de los nuevos azahelicenos se ha llevado a cabo en una ruta sintética que involucra cuatro pasos de síntesis y se han evaluado sus propiedades fotofísicas (Figura 1).




**Esquema 1**. Síntesis de carbazoles, bis(carbazoles) y helicenos

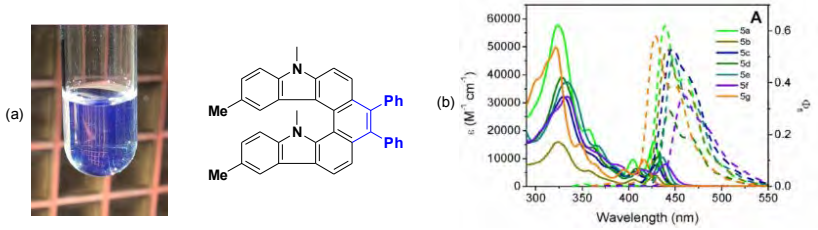



**Figura 1**. (a) Fluorescencia de un diaza-[7]-heliceno. (b) Espectro de absorción y fluorescencia de los diazahelicenos disueltos en DCM

El **objetivo del trabajo de fin de master** que se propone se enmarca en este contexto y se pretende sintetizar una nueva familia de carbazoles, bis(carbazoles) convenientemente funcionalizados para que, mediante diferentes reacciones de acoplamiento se puedan obtener helicenos sobre los que se estudiarán sus propiedades fotofísicas y/o biológicas.

**Capacidades y conocimientos recomendables que debe tener el estudiante para la realización de este proyecto**
Graduado en Química que haya realizado su TFG en Síntesis Orgánica.

**Indíquese cualquier otra aclaración que se considere que pueda ayudar a los estudiantes en la elección del TFM**
El solicitante ampliará y profundizará sus conocimientos en Síntesis Orgánica, técnicas de trabajo en un laboratorio de Química Orgánica y técnicas de elucidación estructural de compuestos orgánicos.

MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGÁNICA

# PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2021-2022

## DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE


| | |
|---|---|
| **Apellidos y nombre del director(es) del proyecto:**<br>Benhamú Salama Bellinda y Vázquez Villa Henar | |
| **Cargo:**<br>Profesora Titular y Profesora Contratada Doctora (respectivamente) | |
| **Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto:**<br>Dpto. de Química Orgánica, UCM – Laboratorio de Química Médica | |
| **Teléfono directo**<br>913945156 y 913945244 | **e-mail**<br>bellinda.benhamu@quim.ucm.es y hvazquez@ucm.es |


## DATOS DEL PROYECTO

| |
|---|
| **Título:** Síntesis y estudio fenotípico de moléculas inspiradas en metabolitos de la microbiota humana |
| **Breve descripción de los objetivos, contenido del proyecto y tareas a realizar**<br>Proyecto dirigido a la síntesis de compuestos que contienen esqueletos privilegiados presentes en los metabolitos de la microbiota humana, como parte de un programa de química médica dirigido a la identificación de fenotipos de interés en moléculas de alta diversidad estructural. El proyecto implicará el aprendizaje y desarrollo de metodologías sintéticas, así como el *screening* primario de los compuestos sintetizados en modelos fenotípicos celulares |
| **Capacidades y conocimientos recomendables que debe tener el estudiante para la realización de este proyecto**<br>Técnicas de síntesis, purificación y elucidación estructural de compuestos orgánicos |
| **Indíquese cualquier otra aclaración que se considere que pueda ayudar a los estudiantes en la elección del TFM**<br>Formación en el área de Química Médica en un entorno multidisciplinar |

MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGÁNICA

# PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2021-2022

## DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE


| | |
|---|---|
| **Apellidos y nombre del director(es) del proyecto:**<br>Canales Mayordomo María Ángeles | |
| **Cargo:**<br>Profesor Contratado Doctor | |
| **Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto:** Química Orgánica, UCM, Facultad de Ciencias Químicas, Avd. Complutense s/n 28040 Madrid | |
| **Teléfono directo**<br>**913945244** | **e-mail**<br>ma.canales@quim.ucm.es |


## DATOS DEL PROYECTO

| |
|---|
| **Título:** Nuevas aplicaciones de la Resonancia Magnética Nuclear para el estudio de interacciones entre biomoléculas. |
| **Breve descripción de los objetivos, contenido del proyecto y tareas a realizar**<br>Puesta a punto de nuevas metodologías para caracterizar glicoproteínas por RMN. Aprendizaje de experimentos modernos de RMN. Expresión y purificación de las proteínas objeto de estudio. |
| **Capacidades y conocimientos recomendables que debe tener el estudiante para la realización de este proyecto**<br>Conocimientos de RMN mono y bidimensional. |
| **Indíquese cualquier otra aclaración que se considere que pueda ayudar a los estudiantes en la elección del TFM** |

MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGÁNICA

# PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL 2021-22 (TFM)

## DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE


| | |
|---|---|
| **Apellidos y nombre del director(es) del proyecto:**<br>Luis Casarrubios Palomar | |
| **Cargo:** Profesor Titular de Química Orgánica | |
| **Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto:**<br>Departamento de Química Orgánica, Facultad de Ciencias Químicas, UCM. Avda. Complutense s/n. 28040 Madrid | |
| **Teléfono directo**<br>91-3944221 | **e-mail**<br>lcasarru@ucm.es |


## DATOS DEL PROYECTO

**Título: SÍNTESIS DE MIMÉTICOS DE HIDROGENASA EN SISTEMAS BIOCOMPATIBLES**

**Breve descripción de los objetivos, contenido del proyecto y tareas a realizar**

El interés por el estudio de la estructura y modo de acción de los tres tipos de hidrogenasas ([Fe]-hidrogenasas, [NiFe]-hidrogenasas y [FeFe]-hidrogenasas) en la última década se debe a su directa relación con la denominada Química del $H_2$ como Fuente de Energía. Es decir, el almacenamiento de $H_2$(gas) por reducción de protones y la liberación de energía por ruptura del enlace H-H en una célula de combustible. De todas ellas, las [FeFe]-hidrogenasas han sido las más estudiadas, ya que están presentes en numerosos microorganismos anaeróbicos.

El objetivo de este trabajo es desarrollar nuevos métodos de síntesis capaces de incorporar en nucleo $[(\mu\text{-}S)_2Fe_2(CO)_6]$ en condiciones muy suaves compatibles con la construcción de nuevas bio-moléculas y el desarrollo de modelos de anclaje a superficies.

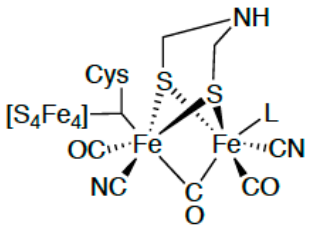



**Figura 1. Estructura de un mimético de [FeFe]-hidrogenasa**

**Capacidades y conocimientos recomendables que debe tener el estudiante para la realización de este proyecto**

Conocimientos básicos de trabajo experimental en química organometálica con buena base teórica en química orgánica y en técnicas espectroscópicas de determinación estructural. El alumno debe tener buena capacidad para el trabajo en equipo, comunicación de resultados y capacidad de adaptación a cambios rápidos en los objetivos perseguidos en función de los resultados.

**Indíquese cualquier otra aclaración que se considere que pueda ayudar a los estudiantes en la elección del TFM**

El grupo de investigación proporciona a sus estudiantes un entorno científico abierto, productivo y dinámico que les permite tener una visión actual e innovadora de la labor investigadora a un alto nivel. Los estudiantes que pasan por nuestros laboratorios obtienen una sólida formación tanto teórica como práctica y son capaces de enfrentarse con un alto grado de éxito al mundo laboral.

MASTERQO
MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGÁNICA

# PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2021-2022

## DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE


| | |
|---|---|
| **Apellidos y nombre del director(es) del proyecto:**<br>SANTIAGO DE LA MOYA CERERO, BEATRIZ LORA MAROTO | |
| **Cargo:**<br>CATEDRÁTICO DE UNIVERSIDAD (SMC)<br>PROFESOR TITULAR DE UNIVERSIDAD (BLM) | |
| **Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto:**<br>QUÍMICA ORGÁNICA (UCM) | |
| **Teléfono directo**<br>**913945090 (SMC)**<br>**913944716 (BLM)** | **e-mail**<br>santmoya@ucm.es<br>belora@ucm.es |


## DATOS DEL PROYECTO

| |
|---|
| **Título: Emisores BODIPY de luz circularmente polarizada para aplicación en fotónica avanzada** |
| **Breve descripción de los objetivos, contenido del proyecto y tareas a realizar**<br><br>Síntesis orgánica enfocada en el desarrollo de colorantes BODIPY con capacidad de exhibir luminiscencia circularmente polarizada (CPL) para aplicaciones fotónicas avanzadas. Tareas a realizar: Síntesis orgánica de BODIPYs quirales (síntesis, aislamiento, purificación y caracterización estructural), caracterización fotofísica de los colorantes obtenidos, establecimiento de correlaciones estructura-actividad fotónica, búsqueda y análisis bibliográfico, y elaboración de informes científicos. |
| **Capacidades y conocimientos recomendables que debe tener el estudiante para la realización de este proyecto**<br><br>Interés en realizar un proyecto multidisciplinar en Química Orgánica y Fotónica. |
| **Indíquese cualquier otra aclaración que se considere que pueda ayudar a los estudiantes en la elección del TFM:**<br><br>Ninguna. |

# PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2021-2022

## DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE

| | |
|---|---|
| **Apellidos y nombre del director(es) del proyecto:**<br>SANTIAGO DE LA MOYA CERERO, FLORENCIO MORENO JIMÉNEZ | |
| **Cargo:**<br>CATEDRÁTICO DE UNIVERSIDAD (SMC)<br>CATEDRÁTICO DE ESCUELA UNIVERSITARIA (FMJ) | |
| **Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto:**<br>QUÍMICA ORGÁNICA (UCM) | |
| **Teléfono directo**<br>**913945090 (SMC)**<br>**913944236 (FMJ)** | **e-mail**<br>santmoya@ucm.es<br>floren@ucm.es |

## DATOS DEL PROYECTO

| |
|---|
| **Título: Tintes avanzados basados en BODIPY** |
| **Breve descripción de los objetivos, contenido del proyecto y tareas a realizar**<br><br>Desarrollo de marcadores fotónicos avanzados basados en colorantes BODIPYs dirigidos al desarrollo de tintas de seguridad y etiquetas fluorescentes. Tareas a realizar: Síntesis orgánica de colorantes (síntesis, aislamiento, purificación y caracterización estructural), caracterización fotofísica de los colorantes, búsqueda y análisis bibliográfico, y elaboración de informes científicos. |
| **Capacidades y conocimientos recomendables que debe tener el estudiante para la realización de este proyecto**<br><br>Interés en realizar un proyecto multidisciplinar en Química Orgánica y Fotónica. |
| **Indíquese cualquier otra aclaración que se considere que pueda ayudar a los estudiantes en la elección del TFM:**<br><br>Ninguna. |

MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGÁNICA

# PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2021-2022

## DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE


| | |
|---|---|
| **Apellidos y nombre del director(es) del proyecto:**<br>Fernández López, Israel | |
| **Cargo:**<br>Profesor Titular de Universidad | |
| **Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto:**<br>Departamento de Química Orgánica I, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Complutense de Madrid, 28040-Madrid | |
| **Teléfono directo**<br>**91 394 4312** | **e-mail**<br>israel@quim.ucm.es |


## DATOS DEL PROYECTO

**Título:** Entiendo los factores que controlan la catálisis

**Breve descripción de los objetivos, contenido del proyecto y tareas a realizar**

En este proyecto, se pretende utilizar métodos computacionales avanzados para el estudio de los factores que controlan la catálisis en reacciones fundamentales en química orgánica como la reacción de Diels-Alder o la reacción de adición de Michael. A pesar de ser reacciones básicas en química orgánica, el modo de acción del catalizador en estos procesos no se conoce de manera detallada. Recientemente, hemos propuesto un nuevo modelo para racionalizar la catálisis en estos sistemas que está teniendo una gran acogida en la comunidad científica (véase *Angew. Chem. Int. Ed*. **2019**, *58*, 8922; *Angew. Chem. Int. Ed*. **2020**, *59*, 6201; *Acc. Chem. Res*. **2021**, *54*, 1972), por lo que muy probablemente los resultados derivados de este TFM se recojan en al menos una publicación internacional importante.

Además, el presente TFM representa una gran oportunidad para introducirse en la Química Computacional, disciplina fundamental en la investigación actual (tanto en la academia como en la industria).

**Capacidades y conocimientos recomendables que debe tener el estudiante para la realización de este proyecto**

En principio, se recomienda un buen conocimiento de reactividad en química orgánica y de mecanismos de reacción.
En cuanto a la parte computacional, sería deseable que el solicitante tuviera conocimientos previos de informática a nivel de usuario en programas con ChemDraw, Origin y Excel

**Indíquese cualquier otra aclaración que se considere que pueda ayudar a los estudiantes en la elección del TFM**

Este TFM se diferencia claramente del resto en que es de naturaleza computacional. La química computacional es hoy en día una herramienta muy útil en química orgánica cuya docencia se encuentra muy limitada en los cursos del Grado en Química y en el Máster en Química Orgánica. Por lo tanto, el estudiante adquirirá conocimientos que le servirán de gran ayuda en su futuro profesional.

MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGÁNICA

# PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2021-2022

## DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE


| | |
|---|---|
| **Apellidos y nombre del director(es) del proyecto: Salvatore Filippone** | |
| **Cargo: Profesor Titular** | |
| **Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto: Química Orgánica** | |
| **Teléfono directo**<br>**913944325** | **e-mail**<br>salvatore.filippone@ucm.es |


## DATOS DEL PROYECTO

**Título: Síntesis enantioselectiva de nanoestructuras de Carbono**

**Breve descripción de los objetivos, contenido del proyecto y tareas a realizar**

Los nanografenos moleculares constituyen una clase singular de materiales funcionales de carbono, de gran interés para la fabricación de dispositivos electrónicos y ópticos. Recientemente, el estudio de las propiedades quirópticas en estos sistemas ha sido objeto de gran atención, debido a la limitada disponibilidad de nanoestructuras de carbono quirales descritas en la literatura.

En este contexto, en el presente proyecto de máster se propone llevar a cabo el diseño y síntesis enantioselectiva de nanografenos moleculares quirales. Esta aproximación supone un reto sintético no abordado hasta el momento por lo que su consecución supondría un hito en el ámbito de los nanografenos moleculares. Para ello, se estudiarán métodos de catálisis asimétrica, nuevos y tradicionales, capaces de hacer frente al desafío de la generación de elementos quirales de forma enantioselectiva en estructuras constituidas exclusivamente por carbonos con hibridación $sp^2$.

**Capacidades y conocimientos recomendables que debe tener el estudiante para la realización de este proyecto.**

Se requiere un buen conocimiento en síntesis orgánica, así como de los métodos de determinación estructural avanzados, fundamentalmente mediante técnicas espectroscópicas y analíticas. Además, una buena dosis de entusiasmo, pasión por la investigación y capacidad de trabajar en equipo.

**Indíquese cualquier otra aclaración que se considere que pueda ayudar a los estudiantes en la elección del TFM**

El proyecto se enmarca dentro del programa global de síntesis de nanoestructuras de carbono avanzadas que se desarrolla en el grupo de "Materiales Moleculares Orgánicos" dirigido por el Prof. Nazario Martín. Este grupo posee la distinción de grupo de excelencia de la Universidad Complutense, y es un grupo de liderazgo contrastado a nivel internacional en nanoformas de carbono para aplicaciones en materiales 1D y 2D, energía fotovoltaica, y aplicaciones biomédicas.

El estudiante podrá familiarizarse con los métodos y las técnicas más avanzados y empleados en un laboratorio de química orgánica moderna. En particular, aprenderá el uso de la técnica de cromatografía líquida de alta eficacia (HPLC) así como la determinación e interpretación de espectros de dicroísmo circular. Para más información, se puede visitar la página web del grupo en: nazariomartingroup.com

MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGÁNICA

# PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2021-2022

## DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE

| | |
|---|---|
| **Apellidos y nombre del director(es) del proyecto:**<br>García Csáky, Aurelio // Sánchez Sancho, Francisco | |
| **Cargo:**<br>Catedrático de Química Orgánica // Científico Titular | |
| **Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto:**<br>Depto. Química Orgánica, Facultad CC. Químicas UCM e Instituto Pluridisciplinar UCM // IQM CSIC | |
| **Teléfono directo**<br>**913943238** | **e-mail**<br>csaky@ucm.es // psanchez@iqm.csic.es |

## DATOS DEL PROYECTO

| |
|---|
| **Título: Síntesis orgánica de nuevos compuestos con actividad antiinflamatoria** |
| **Breve descripción de los objetivos, contenido del proyecto y tareas a realizar**<br>Síntesis de compuestos con actividad antiinflamatoria, en el marco de las actividades del Grupo de Síntesis Orgánica y Bioevaluación del Instituto Pluridisciplilnar UCM, Unidad Asociada de I+D+I al CSIC a través del Instituto de Ciencia y Tecnología de Polímeros (ICTP) y del Instituto de Química Médica (IQM) (https://www.ucm.es/ip-1/osap-index). |
| **Capacidades y conocimientos recomendables que debe tener el estudiante para la realización de este proyecto**<br>Síntesis y reactividad de moléculas orgánicas, caracterización de compuestos orgánicos mediante RMN y MS. |
| **Indíquese cualquier otra aclaración que se considere que pueda ayudar a los estudiantes en la elección del TFM** |

MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGÁNICA

# PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2021-2022

## DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE


| | |
|---|---|
| **Apellidos y nombre del director(es) del proyecto:**<br>Prof. David García Fresnadillo. | |
| **Cargo:**<br>Profesor Titular de Universidad. | |
| **Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto:**<br>Química Orgánica, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Complutense de Madrid<br>28040 Avda. Complutense s/n, Ciudad Universitaria, Madrid. | |
| **Teléfono directo**<br>91 394 5140 | **e-mail**<br>dgfresna@ucm.es |


## DATOS DEL PROYECTO

| |
|---|
| **Título:**<br>Síntesis y caracterización de nanopartículas de carbono para aplicaciones fotoquímicas avanzadas. |
| **Breve descripción de los objetivos, contenido del proyecto y tareas a realizar**<br>Preparación y caracterización de nuevos materiales basados en nanoestructuras de carbono para el desarrollo de aplicaciones en las áreas biomédica, medioambiental, energética y de síntesis orgánica.<br>Síntesis, aislamiento y purificación de compuestos químicos orgánicos y materiales basados en nanoestructuras de carbono. Caracterización estructural general (RMN, EM, IR, UV-Vis, microscopía) y fotofísica (propiedades de los estados excitados de las moléculas y los materiales). Desarrollo de experimentos de caracterización específica de los compuestos sintetizados, según el ámbito de aplicación de los mismos. |
| **Capacidades y conocimientos recomendables que debe tener el estudiante para la realización de este proyecto**<br>Síntesis, aislamiento, purificación y caracterización estructural de compuestos orgánicos. |
| **Indíquese cualquier otra aclaración que se considere que pueda ayudar a los estudiantes en la elección del TFM**<br>Interés por la fotoquímica y sus aplicaciones en las áreas biomédica, medioambiental, energética y de síntesis orgánica. Interés por la preparación y caracterización de las propiedades de nuevos compuestos orgánicos y nuevos nanomateriales de carbono. Interés por las aplicaciones de la Química y su impacto en la sociedad. |

# PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2021-2022

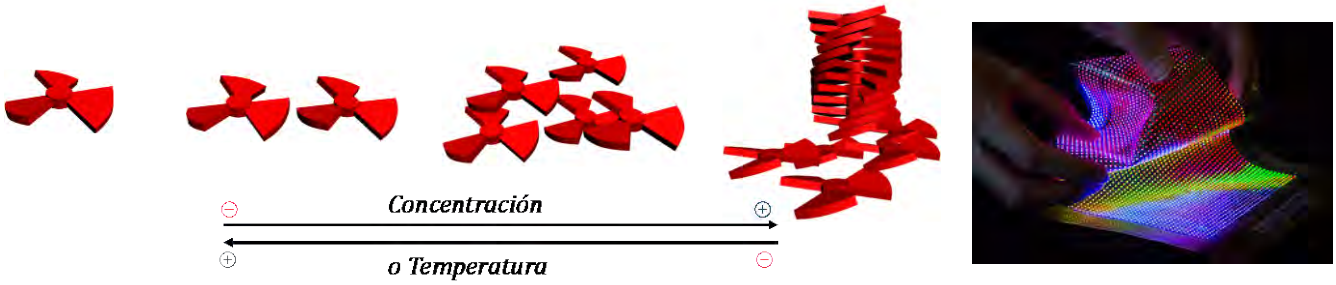
## DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE


| | |
|---|---|
| **Apellidos y nombre del director(es) del proyecto: García Melo, Fátima / Gómez Aspe, Rafael** | |
| **Cargo:** Profesora Ayudante Doctora / Profesor Titular | |
| **Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto:** Departamento de Química Orgánica, Facultad de Química, UCM | |
| **Teléfono directo** 913944333 | **e-mail** rafaelgomez@quim.ucm.es<br>fatima.garcia@usc.es |


## DATOS DEL PROYECTO

**Título:** Diseño, síntesis y estudio de polímeros supramoleculares luminiscentes

**Breve descripción de los objetivos, contenido del proyecto y tareas a realizar.** En este trabajo se llevará a cabo la síntesis de distintos monómeros, siguiendo rutas sintéticas en varios pasos utilizando tanto reacciones químicas clásicas como otras más avanzadas, formados por un núcleo aromático relativamente extendido y capaz de emitir luz. También estarán funcionalizados con cadenas alquílicas quirales solubilizantes y grupos amida, que permitan su interacción mediante fuerzas intermoleculares y formen de manera espontánea polímeros supramoleculares. Una vez llevada a cabo su síntesis y estudiada su capacidad para formar polímeros supramoleculares, mediante distintas técnicas (UV-Vis, NMR, CD, microscopía electrónica, etc.) se procederá a estudiar sus propiedades luminiscentes así como el efecto que las cadenas laterales tienen en la quiralidad de las estructuras finales.




Representación esquemática de un proceso de polimerización supramolecular para generar estructuras helicoidales y diodo emisor de luz (LED) flexible

**Capacidades y conocimientos recomendables que debe tener el estudiante para la realización de este proyecto.** Conocimientos teóricos y prácticos de Química Orgánica a nivel de Grado; interés, motivación para trabajar y aprender, debido al enfoque multidisciplinar del trabajo

**Indíquese cualquier otra aclaración que se considere que pueda ayudar a los estudiantes en la elección del TFM.** El trabajo se realizará en el grupo de investigación Moléculas Anfifílicas y Polímeros Supramoleculares de la UCM (www.ucm.es/supramolecular).

MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGÁNICA

# PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL 2021-22 (TFM)

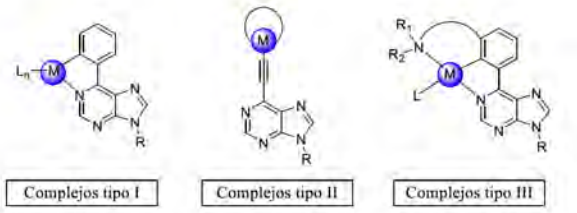
## DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE


| | |
|---|---|
| **Apellidos y nombre del director(es) del proyecto:**<br>Mar Gómez Gallego | |
| **Cargo:**<br>Catedrático de Química Orgánica | |
| **Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto:**<br>Departamento de Química Orgánica I, Universidad Complutense de Madrid.<br>Avda. Complutense s/n. 28040 Madrid | |
| **Teléfono directo**<br>913944147 | **e-mail**<br>margg@ucm.es |


## DATOS DEL PROYECTO

**Título: COMPLEJOS METÁLICOS CON PROPIEDADES LUMINISCENTES DERIVADOS DE NUCLEOBASES PÚRICAS Y PIRIMIDÍCAS**

La combinación de nucleobases con complejos de metales de transición no sólo da lugar a nuevas estructuras no-naturales de propiedades y reactividad desconocidas, sino que permite diseñar modelos para el estudio de nuevas propiedades en oligonucleótidos y por extensión en DNA. En este trabajo se desarrollará metodología para combinar la estructura de nucleobases pirimidínicas y púricas con complejos ciclometalados de Pt(II) y se estudiarán sus propiedades fotofísiscas (luminiscencia) y electroquímicas . La extensión a sistemas di y polinucleares permitirá preparar estructuras complejas en las que estudiar la interacción entre los complejos metálicos y determinar la influencia de los espaciadores sobre las propiedades observadas.




**Capacidades y conocimientos recomendables que debe tener el estudiante para la realización de este proyecto**

Conocimientos básicos de trabajo experimental en química organometálica con buena base teórica en química orgánica y en técnicas espectroscópicas de determinación estructural. El alumno debe tener buena capacidad para el trabajo en equipo, comunicación de resultados y capacidad de adaptación a cambios rápidos en los objetivos perseguidos en función de los resultados.

**Indíquese cualquier otra aclaración que se considere que pueda ayudar a los estudiantes en la elección del TFM**

El grupo de investigación proporciona a sus estudiantes un entorno científico abierto, productivo y dinámico que les permite tener una visión actual e innovadora de la labor investigadora a un alto nivel. Los estudiantes que pasan por nuestros laboratorios obtienen una sólida formación tanto teórica como práctica y son capaces de enfrentarse con un alto grado de éxito al mundo laboral.

MASTERQO
MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGÁNICA

# PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2021-2022

## DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE


| | |
|---|---|
| **Apellidos y nombre del director del proyecto:** Herranz Astudillo, Mª Ángeles / Rodríguez Pérez, Laura | |
| **Cargo:** Profesora Titular de Universidad / Profesora Ayudante Doctor | |
| **Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto:** Departamento de Química Orgánica, Facultad de Ciencias Químicas. Avda. Complutense s/n. Ciudad Universitaria. 28040 Madrid | |
| **Teléfono directo:** 913944223 / 913945155 | **e-mail:** maherran@ucm.es / laura.rodriguez.perez@quim.ucm.es |

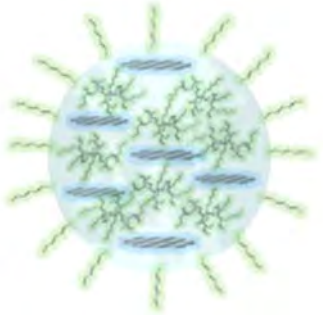

## DATOS DEL PROYECTO

**Título:** Puntos de carbono para aplicaciones en biosensores

**Breve descripción de los objetivos, contenido del proyecto y tareas a realizar**

En este trabajo de investigación, se propone mejorar la síntesis y caracterización de propiedades de nanomateriales de carbono como los nanopuntos de carbono (CDs), obtenidos a partir de grafeno, o a partir de precursores moleculares sencillos. Este tipo de materiales orgánicos son fluorescentes y su color de emisión varia con la composición (ver Figura), y están encontrando aplicabilidad en distintas áreas de gran impacto social dentro de la química como son la energía, la catálisis o la biomedicina, precisamente debido a esta propiedad.

En estudios recientes sobre estos sistemas, hemos llevado a cabo la preparación de los primeros CDs quirales a partir de grafito y unidades enantioméricamente puras sencillas, en un trabajo pionero en la introducción de quiralidad en derivados de grafeno (*Chem. Commun.*, **2016**, *52*, 665; *Acc. Chem. Res.* **2019**, *52*, 1565). También, hemos combinado CDs con unidades electroactivas y estudiado procesos de transferencia electrónica fotoinducida, análogos a los que se producen en la fotosíntesis natural (*Angew. Chem. Int. Ed.*, **2018**, *57*, 1001; *Chem. Commun.*, **2019**, *55*, 3223; *J. Am. Chem. Soc.* **2020**, *142*, 20324).



Dentro de este proyecto, el estudiante adquirirá experiencia en la preparación de CDs a partir de diferentes estrategias sintéticas, y también llevará a cabo su modificación posterior mediante metodologías clásicas en química orgánica covalente o supramolecular, con objeto de desarrollar sensores ópticos o electroquímicos para la detección de cationes fisiológicos o biomoléculas. Además de la labor sintética, el estudiante adquirirá experiencia en la caracterización estructural de moléculas orgánicas (RMN, IRTF, Masas) y nanomateriales (ATG, Raman, TEM, AFM, XRD), y en la determinación de sus propiedades optoelectrónicas (absorción, emisión, electroquímica).

**Capacidades y conocimientos recomendables que debe tener el estudiante para la realización de este proyecto**

Se precisan los conocimientos de un graduado en química, con interés por la síntesis orgánica y los nanomateriales de carbono, su caracterización estructural y de propiedades. Es importante la capacidad de trabajo en equipo y la disposición para el aprendizaje de diferentes técnicas instrumentales.

**Indíquese cualquier otra aclaración que se considere que pueda ayudar a los estudiantes en la elección del TFM**

El trabajo de investigación se llevara a cabo dentro del Grupo de Materiales Moleculares Orgánicos de la UCM (http://nazariomartingroup.com/), grupo de referencia en el área de investigación en la que se enmarca esta propuesta. El Trabajo de Fin de Máster, permitirá al estudiante formarse dentro de un equipo de químicos sintéticos multidisciplinares, familiarizándose también con el lenguaje propio de otras disciplinas, y dentro de un equipo altamente competitivo a nivel tanto nacional como internacional.

MASTERQO
MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGÁNICA

# PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2021-2022

## DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE


| | |
|---|---|
| **Apellidos y nombre del director(es) del proyecto:**<br>Beatriz M. Illescas Martínez / Justo Cabrera-González | |
| **Cargo:**<br>Profesora Titular / Investigador Postdoctoral (respectivamente) | |
| **Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto:**<br>Departamento de Química Orgánica (UCM), Facultad de CC. Químicas, Ciudad Universitaria s/n | |
| **Teléfono directo**<br>913944230 | **e-mail**<br>beti@ucm.es / justocab@ucm.es |


## DATOS DEL PROYECTO

**Título:** Síntesis de fullerenos multivalentes con potenciales aplicaciones en nanomedicina

**Breve descripción de los objetivos, contenido del proyecto y tareas a realizar**

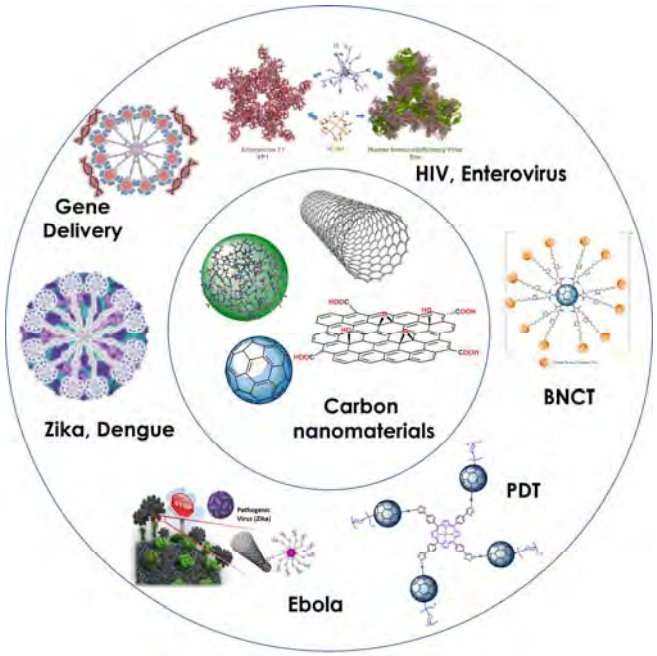



***Figura 1.*** *Aplicaciones biológicas de sistemas multivalentes basados en nanoestructuras de carbono preparados en nuestro grupo de investigación.*

La preparación de derivados basados en fullerenos ha demostrado un gran potencial para diseñar nanoestructuras que actúan como agentes antivirales, antioxidantes, agentes de contraste o como plataformas para el transporte de fármacos.

En nuestro grupo de investigación, hemos desarrollado diversos sistemas basados en la estrategia de la multivalencia. De esta forma, se pueden sintetizar nanoestructuras que porten un número variable del agente activo de interés soportado sobre fullerenos, lo que se traduce en un aumento de la eficacia del efecto biomédico. Por ejemplo, se han desarrollado inhibidores antivirales basados fullerenos que contienen un numero variable de carbohidratos, mostrando excelentes resultados frente a virus como el Ébola, Zika o Dengue.

Teniendo en cuenta el potencial que presentan estos derivados multivalentes en el campo de la nanomedicina, esta línea de trabajo pretende obtener nuevos fullerenos funcionalizados covalentemente con un número variable de agentes activos que presenten actividad biológica o terapéutica.

Para realizar tal trabajo, se llevarán a cabo reacciones típicas de la química de fullerenos (reacción de ciclopropanación de Bingel) así como de *click-chemistry*, etc. Los productos obtenidos se purificarán adecuadamente mediante diversas técnicas, y se caracterizarán mediante RMN, FTIR, espectrometría de masas, etc. Además, se podrán emplear otras técnicas como UV-Vis o fluorimetría, así como técnicas de microscopía electrónica (TEM, SEM, XPS...).

Los compuestos finales que se obtengan serán objeto ensayos biológicos en colaboración con otros grupos de investigación, tanto a nivel nacional como internacional.

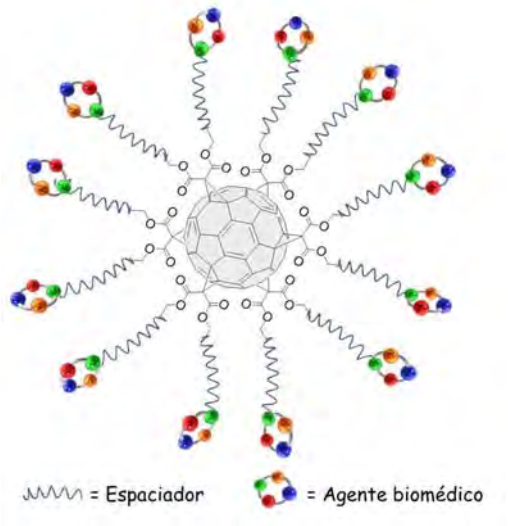



***Figura 2.*** *Representación de las nanoestructuras propuestas en la línea de trabajo.*

**Capacidades y conocimientos recomendables que debe tener el estudiante para la realización de este proyecto**

El alumno deberá tener conocimientos de síntesis, purificación y determinación estructural de compuestos orgánicos.

**Indíquese cualquier otra aclaración que se considere que pueda ayudar a los estudiantes en la elección del TFM**

El proyecto está dirigido por Beatriz Illescas (https://orcid.org/0000-0002-4727-8291) y Justo Cabrera (https://orcid.org/0000-0002-7733-9681), que forman parte del grupo de Materiales Moleculares Orgánicos dirigido por el profesor Nazario Martín (página web del grupo http://www.nazariomartingroup.com). El estudiante podrá adquirir una formación multidisciplinar, ya que además de llevar a cabo la síntesis y determinación estructural orgánica, la caracterización de los productos se complementará con técnicas específicas como UV-Vis, Fluorimetría, AFM, TEM; SEM, DLS, Raman, etc. según el tipo de compuesto, y el estudiante tendrá además la oportunidad de adquirir conocimientos en la interpretación de resultados biológicos.

**Selección de publicaciones del grupo relacionadas con el proyecto**

a) Multivalent Tryptophan- and Tyrosine-Containing [60]Fullerene Hexa-Adducts as Dual HIV and Enterovirus A71 Entry Inhibitors, **2021,** DOI: 10.1002/chem.202101098

b) Multivalent cationic dendrofullerenes for gene transfer: synthesis and DNA complexation, *J. Mater. Chem. B*, **2020**, 8, 4505-4515.

c) Synthesis of Highly Efficient Multivalent Disaccharide/[60]Fullerene Nanoballs for Emergent Viruses, *J. Am. Chem. Soc.* **2019**, 141, 38, 15403–15412.

MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGÁNICA

# PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2021-2022

## DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE


| | |
|---|---|
| **Apellidos y nombre del director(es) del proyecto:**<br>**Luna Costales, Amparo y Almendros Requena Pedro** | |
| **Cargo:**<br>**PROFESORA TITULAR DE UNIVERSIDAD y PROFESOR DE INVESTIGACIÓN DE ORGANISMO PÚBLICOS DE INVESTIGACIÓN** | |
| **Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto:**<br>**QUÍMICA ORGÁNICA, FACULTAD CIENCIAS QUÍMICAS, UNIVERSIDAD COMPLUTENSE DE MADRID** | |
| **Teléfono directo**<br>**91 394 5143** | **e-mail: alunac@ucm.es; palmendros@iqog.csic.es** |


## DATOS DEL PROYECTO

**Título:** Alenos y alquinos en la síntesis eficiente de nuevos heterociclos bioactivos

**Breve descripción de los objetivos, contenido del proyecto y tareas a realizar**

Durante los últimos años, la química de alenos ha despertado un gran interés en campos como la Síntesis Orgánica o la Química Médica. Los alenos son compuestos que se caracterizan por la presencia de dos doble enlaces acumulados y entre las reacciones que destacan en la bibliografía referentes a la funcionalidad alénica, predominan las reacciones de heterociclación de alenos catalizadas por metales de transición.

La presencia de sulfonas en compuestos orgánicos es muy atractiva debido a sus propiedades farmacológicas, su uso en química de materiales y su relevancia como intermedio sintético. En el presente trabajo de Máster se pretende como objetivo, la puesta a punto de nuevos procesos de ciclación en sistemas insaturados, utilizando catálisis metálica tanto en sistemas homogéneos como heterogéneos (nanopartículas metálicas, NPs) con el fin de lograr una síntesis selectiva de sistemas heterocíclicos estructuralmente novedosos y de gran relevancia química y biológica. En el trabajo experimental se desarrollará la formación de nuevos compuestos sulfonados con sustituyentes de diferentes características estereoelectrónicas.

**Reacción de ciclación de alenos**

**Capacidades y conocimientos recomendables que debe tener el estudiante para la realización de este proyecto**
Graduado en Química con experiencia (TFG) en Síntesis Orgánica y con capacidad de trabajo en equipo

**Indíquese cualquier otra aclaración que se considere que pueda ayudar a los estudiantes en la elección del TFM**
El alumno podrá compatibilizar el desarrollo del proyecto con las asignaturas en que se encuentre matriculado en el Máster. El presente proyecto destaca por promover la iniciación en tareas de investigación a un alto nivel y el trabajo se llevará a cabo en el grupo Química de Sistemas Insaturados y Heterociclos Bioactivos (página web del grupo: https://www.ucm.es/beta-lactamas).

MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGÁNICA

# PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2021-2022

## DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE


| | |
|---|---|
| **Apellidos y nombre del director(es) del proyecto:**<br>Mancheño Real, Mª José y Ávila Brande, David | |
| **Cargo:**<br>Catedrático de Química Orgánica y Profesor de titular de Química Inorgánica | |
| **Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto:**<br>Dpto. Química Orgánica y Química Inorgánica, Facultad de Ciencias Químicas, UCM | |
| **Teléfono directo** 913945144 (MJ)/913944355(D) | **e-mail** mjmreal@ucm.es; **davilabr@ucm.es** |


## DATOS DEL PROYECTO

| |
|---|
| **Título:** Síntesis y estructura de nanomateriales para su aplicación en dispositivos de almacenamiento de energía |
| **Breve descripción de los objetivos, contenido del proyecto y tareas a realizar**<br>The increasing demand for sustainable energy makes necessary the design and preparation of new materials to improve the way to store and convert energy. Among them, organic electrode materials have the advantages of being lightweight and having high specific capacity, low environmental footprints, diverse molecular structures, and controllable design, in fact they are regarded as next-generation electrode materials with great application prospects. Therefore, the proposal for this project is based on the synthesis and characterization of a new materials based on organic structures as potential candidates for their use in capacitors.<br>Tareas a realizar: Síntesis y caracterización estructural de moléculas orgánicas, síntesis y caracterización de materiales orgánicos porosos, evaluación de propiedades electroquímicas del material, diseño del supercondensador. |
| **Capacidades y conocimientos recomendables que debe tener el estudiante para la realización de este proyecto**<br>Conocimientos de síntesis orgánica. |
| **Indíquese cualquier otra aclaración que se considere que pueda ayudar a los estudiantes en la elección del TFM**<br>Proyecto multidisciplinar basado principalmente en síntesis orgánica y caracterización de nanomateriales para posterior evaluación de propiedades electroquímicas |

MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGÁNICA

# PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2021-2022

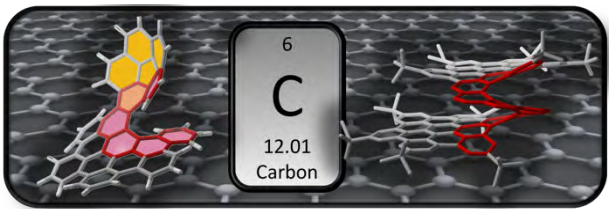
## DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE


| | |
|---|---|
| **Apellidos y nombre del director(es) del proyecto:** Nazario Martín León / Jesús Manuel Fernández García | |
| **Cargo:** Catedrático de Universidad / Investigador Posdoctoral Contratado | |
| **Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto:** Departamento de Química Orgánica, Facultad de Ciencias Químicas, Avda. de la Complutense s/n. Ciudad Universitaria 28040 Madrid | |
| **Teléfono directo** 91 394 4227 | **e-mail** nazmar@ucm.es |


## DATOS DEL PROYECTO

**Título: Síntesis "bottom-up" de nanografenos moleculares con propiedades optoelectrónicas**

**Breve descripción de los objetivos, contenido del proyecto y tareas a realizar**




Desde su descubrimiento en 2oo4, el grafeno se ha convertido en el material más prometedor del s. XXI debido a sus propiedades mecánicas y electrónicas. El solapamiento entre las bandas de valencia y de conducción hace que se comporte como un material conductor. Sin embargo, si se confinan los electrones en fragmentos de grafeno de tamaño nanométrico denominados nanografenos, se crea una separación entre las bandas de conducción y de valencia obteniéndose estructuras con nuevas propiedades optoelectrónicas, lo que abre un abanico de nuevas aplicaciones para los materiales grafénicos.

La síntesis orgánica está empezando a jugar un papel muy importante en la preparación de materiales nanografénicos moleculares. El uso de reacciones orgánicas clásicas permite la construcción de nanografenos moleculares partiendo de hidrocarburos policíclicos aromáticos más pequeños. Este tipo de síntesis se denomina síntesis "bottom-up" y permite un control preciso de la estructura final y por lo tanto de sus propiedades.

Este proyecto de máster se centrará en el diseño racional y creativo de nuevos nanografenos moleculares y su preparación a través de síntesis "bottom-up. Esta metodología permite introducir en la estructura de la molécula diferentes características, como curvatura o helicidad, dotando al material final de nuevas propiedades como por ejemplo la quiralidad. Además, se procederá al estudio de sus propiedades optoelectrónicas como absorción y emisión de luz, potenciales de oxidación y reducción y, en el caso de tener centros estereogénicos, sus propiedades quirópticas. Los compuestos sintetizados, pueden ser candidatos para futuros estudios de introducción de metales alcalinos en las estructuras, transferencia de carga fotoinducida o capacidad como transportadores de huecos y/o de electrones para dispositivos fotovoltaicos de naturaleza orgánica e híbrida. Estos estudios se realizarán en colaboración con grupos de investigación de renombre internacional, especialistas en algunas de estas metodologías.

**Publicaciones recientes de nuestro grupo de investigación en la línea de trabajo propuesta:**


[a] Evans, P. J.; Ouyang, J.; Favereau, L.; Crassous, J.; Fernández, I.; Perles, J.; Martín, N. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2018**, *57*, 6774–6779. [b] Fernández-García J. M.; Evans P. J.; Medina Rivero S.; Fernández I.; García-Fresnadillo D.; Perles J.; Casado J.; Martín N. *J. Am. Chem. Soc.* **2018**, *140*, 17188–17196. [c] Urieta-Mora, J; Krug, M; Alex, W; Perles, J; Fernańdez, I; Molina-Ontoria, A; Guldi, D. M.; Martín, N. *J. Am. Chem. Soc.* **2020**, *142*, 4162. [d] J. M. Fernández-García, P. J. Evans, S. Filippone, M. A. Herranz, N. Martín, "Chiral Molecular Carbon Nanostructures", *Acc. Chem. Res.* **2019**, *52*, 1565-1574.


**Capacidades y conocimientos recomendables que debe tener el estudiante para la realización de este proyecto**

Se requieren los conocimientos de un graduado en química, preferiblemente en Química Orgánica, con una gran motivación por la síntesis orgánica de nuevas moléculas policíclicas aromáticas y en la preparación de nanografenos moleculares. Es importante la capacidad de trabajo en equipo y la disposición para el aprendizaje de diferentes técnicas instrumentales.

**Indíquese cualquier otra aclaración que se considere que pueda ayudar a los estudiantes en la elección del TFM**

El trabajo de investigación se llevará a cabo dentro del Grupo de Materiales Moleculares Orgánicos de la UCM (http://nazariomartingroup.com/), grupo de referencia internacional en el área de investigación en la que se enmarca esta propuesta. El Proyecto/Trabajo de Fin de Máster, permitirá al estudiante formarse dentro de un equipo de químicos sintéticos multidisciplinares, familiarizándose también con el lenguaje propio de otras disciplinas.

MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGÁNICA

# PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2021-2022

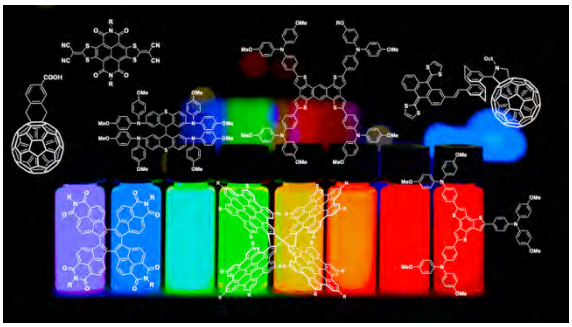
## DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE


| | |
|---|---|
| **Apellidos y nombre del director(es) del proyecto:** Martín, Nazario / Molina Ontoria, Agustín | |
| **Cargo:** Catedrático / Investigador Ramón y Cajal | |
| **Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto:** Universidad Complutense de Madrid, Facultad de Químicas, Departamento de Química Orgánica I, Av. Complutense s/n | |
| **Teléfono directo:** 913944332 | **e-mail:** amolinao@ucm.es, nazmar@ucm.es |


## DATOS DEL PROYECTO

**Título:** Materiales orgánicos disruptivos para el transporte de cargas en células solares híbridas basadas en perovskitas

**Breve descripción de los objetivos, contenido del proyecto y tareas a realizar**



El objetivo de la presente propuesta es explorar el comportamiento fotovoltaico de nuevos materiales disruptivos basados en nanografenos "a la carta", así como el estudio de sus propiedades ópticas y electroquímicas. Este estudio representa un desafío de importantes dimensiones ya que engloba dos temas de gran relevancia en la química y física actual. Por lo tanto, la presente propuesta describe un programa de investigación fundamental y tecnológico diseñado para obtener nuevos conocimientos para el desarrollo de nuevas estructuras de nanografenos y su modificación química adicional para la preparación de arquitecturas y materiales más sofisticados.

Una vez sintetizados los materiales derivados de nanografenos se procederá a la fabricación y estudio de dispositivos fotovoltaicos sensibilizados con perovskita. La energía de los orbitales frontera de los nuevos materiales sintetizados se estimará mediante electroquímica. De esta forma, se podrá determinar que perovskita es la más adecuada para cada uno de los materiales. Típicamente, los materiales transportadores de huecos se utilizarán en dispositivos convencionales, siendo su estructura (ITO/TiO2 compacto/TiO2 mesoporoso/perovskita/HTM/Au). Por otro lado, los materiales transportadores de electrones se utilizarán en dispositivos invertidos, siendo su estructura (ITO/PEDOT:PSS/perovskita/ETM/Al).

Esta actividad de investigación debe dar respuesta a las necesidades fundamentales y tecnológicas actuales y reforzará e integrará sustancialmente la sólida posición de Europa en el conocimiento de las nanoformas de carbono (nanociencia) y su prácticamente inexplorado uso en dispositivos fotovoltaicos.

Publicaciones recientes en la línea de trabajo propuesta:


1. A. Molina-Ontoria, I. Zimmermann, I. García-Benito, P. Gratia, C. Roldán-Carmona, S. Aghazada, M. Grätzel, M. K. Nazeeruddin, N. Martín, *Angew. Chem., Int. Ed.* **2016**, *55*, 6270; 2. I. Zimmermann, J. Urieta-Mora, P. Gratia, J. Aragó, G. Grancini, A. Molina-Ontoria, E. Ortí, N. Martín, M. K. Nazeeruddin, *Adv. Energy Mater.* **2017**, *7*, 1601674; 3. I. García-Benito, I. Zimmermann, J. Urieta-Mora, J. Aragó, A. Molina-Ontoria, E. Ortí, N. Martín, M. K. Nazeeruddin, *J. Mater. Chem. A*, **2017**, *5*, 8317–8324; 4. I. García-Benito, I. Zimmermann, J. Urieta-Mora, J. Aragó, J. Calbo, J. Perles, A. Serrano, A. Molina-Ontoria, E. Ortí, N. Martín, M. K. Nazeeruddin, *Adv. Funct. Mater.* **2018**, DOI: 10.1002/adfm.201801734.


**Capacidades y conocimientos recomendables que debe tener el estudiante para la realización de este proyecto**

Se precisan los conocimientos de un graduado en química, con interés por la síntesis de materiales orgánicos y la preparación de dispositivos fotovoltaicos. Es importante la capacidad de trabajo en equipo y la disposición para el aprendizaje de diferentes técnicas instrumentales.

**Indíquese cualquier otra aclaración que se considere que pueda ayudar a los estudiantes en la elección del TFM**

El trabajo de investigación se llevará a cabo dentro del Grupo de Materiales Moleculares Orgánicos en IMDEA Nanociencia (http://nazariomartingroup.com/), grupo de referencia en el área de investigación en la que se enmarca esta propuesta. El Proyecto/Trabajo de Fin de Máster, permitirá al estudiante formarse dentro de un equipo de químicos sintéticos multidisciplinares, familiarizándose también con el lenguaje propio de otras disciplinas, y dentro de un equipo altamente competitivo a nivel tanto nacional como internacional.

MASTERQO
MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGÁNICA

# PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL 2021-22 (TFM)

## DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE


**Apellidos y nombre del director(es) del proyecto: MARTÍNEZ DEL CAMPO, TERESA y CEMBELLíN SANTOS, SARA**

**Cargo: PROFESORA TITULAR UNIVERSIDAD y PROFESORA CONTRATADA DOCTOR**

**Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto: QUÍMICA ORGÁNICA, FACULTAD CIENCIAS QUÍMICAS, UNIVERSIDAD COMPLUTENSE DE MADRID**

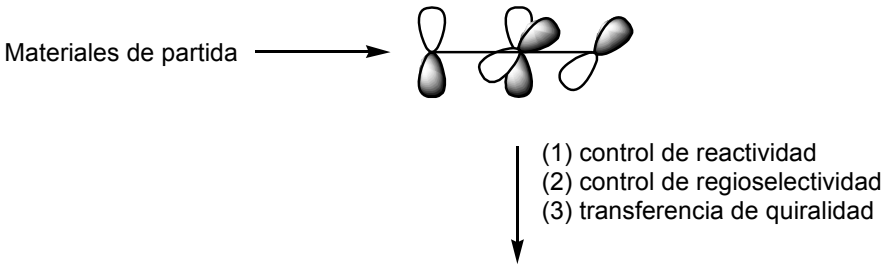
| **Teléfono directo** | **e-mail** |
|---|---|
| **913945143** | **tmcampo@quim.ucm.es, scembellin@ucm.es** |


## DATOS DEL PROYECTO

**Título:** "Nuevas metodologías sintéticas basadas en alenos, alquinos y heterociclos bioactivos"

**Breve descripción de los objetivos, contenido del proyecto y tareas a realizar**

La síntesis del primer aleno data del año 1887, y su estructura no se confirmó hasta el año 1954. Durante mucho tiempo se pensó que eran compuestos altamente inestables y por ese motivo, sus aplicaciones químicas y sintéticas no estuvieron bien establecidas. Sin embargo, la presencia de un cumuleno diénico en su estructura hacía a estos compuestos bastante interesantes. Entre sus propiedades más importantes cabe destacar las siguientes: 1) debido a la posibilidad de albergar hasta cuatro sustituyentes en su estructura, los convierten en punto de partida de un gran número de rutas de síntesis, 2) la densidad electrónica así como la reactividad de cada átomo de carbono del aleno puede ser modulada en función del sustituyente, 3) la inherente quiralidad axial permite la síntesis estereoselectiva de alenos ópticamente activos, así como la transferencia de quiralidad desde el aleno al producto final.



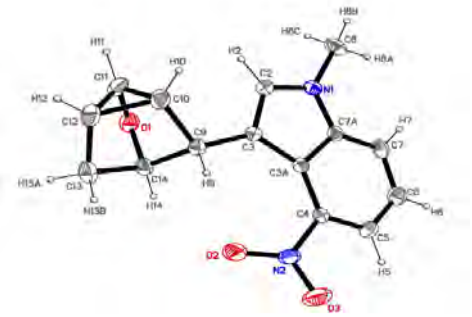

Por todo ello, los alenos son precursores sintéticos muy útiles en síntesis orgánica debido a su versatilidad para llevar a cabo diferentes transformaciones. De entre los diferentes modos de reacción, aquel que implica la activación de uno de los dobles enlaces cumulénicos por tratamiento con un ácido de Lewis o Brönsted es especialmente útil ya que permite un ataque nucleófilo posterior que conlleva la formación de un nuevo enlace C–C o C–heteroátomo a través de una transformación inter- o intramolecular. Los catalizadores de metales tales como Au, Pt, Ag y Pd son muy adecuados para la activación selectiva de alenos en presencia de otras funcionalidades reactivas.

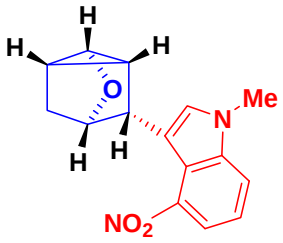
En el presente trabajo se pretende como objetivo general la puesta a punto de procesos de funcionalización en alenos y/o alquinos, con el fin de lograr síntesis eficientes quimio-, regio- y estereocontroladas de sistemas cíclicos o acíclicos estructuralmente novedosos y de potencial actividad biológica o con propiedades físicas relevantes.

El plan de formación consistirá en dos etapas: en primer lugar, se llevará a cabo el análisis retrosintético de los alenos o alquinos precursores, estableciendo así las etapas sintéticas clave para llevar a cabo la metodología necesaria. Y en segundo lugar, una vez preparados estos precursores, el alumno/a llevaría a cabo la optimización de condiciones de reacción para

conseguir la reacción deseada, y extenderá dicha metodología a la colección de precursores preparados con el fin de obtener un gran número de productos finales y poder evaluar su potencial actividad biológica.

A modo de ejemplo se muestra la figura de rayos X de uno de los aductos tipo caja obtenido a partir de un novedoso proceso támden de hidroarilación/ruptura de enlace a partir de alenos funcionalizados.






**Capacidades y conocimientos recomendables que debe tener el estudiante para la realización de este proyecto**
Graduado en Química con experiencia (TFG) en Síntesis Orgánica.

**Indíquese cualquier otra aclaración que se considere que pueda ayudar a los estudiantes en la elección del TFM**
El grupo de Lactamas y Heterociclos Bioactivos (Unidad Asociada UCM-CSIC) ha desarrollado una actividad de investigación intensiva para un grupo de tamaño mediano. Durante los últimos 5 años (2016-2021), el grupo publicó 34 artículos de investigación en revistas de investigación internacionales y obtuvo una patente. Un número significativo de estos artículos aparecieron en revistas de gran prestigio internacional en las áreas de Química Multidisciplinar y Química Orgánica como *ACS Catal* (2 artículos, FI: 12.221), *Chem. Comun.* (5 artículos, FI: 6.164), *Adv. Synth. Catal.* (9 artículos, FI: 5.451), o *Chem. Eur. J.* (13 artículos, FI: 5.160). El grupo también realizó excelentes revisiones que se han publicado en revistas líderes como *Chem. Soc. Rev.* (FI: 40.443) o *Acc. Chem. Res.* (FI: 21.661). Además, también se ha escrito un número significativo de capítulos de libros (7) con un estándar de calidad muy alto y publicados en las mejores Editoriales (Elsevier, Springer, etc.).
Según la excelente calidad de la investigación, el grupo cuenta con un fondo estable proveniente de las convocatorias nacionales (Ministerio de Economía y Competitividad y más recientemente Agencia Estatal de Investigación). La participación del grupo en actividades internacionales también es destacable. El grupo tiene una red estable con colaboradores internacionales, capacita a investigadores internacionales y organiza actividades formativas.

MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGÁNICA

# PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2021-2022

## DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE


| | |
|---|---|
| **Apellidos y nombre del director(es) del proyecto:**<br>**Paloma Martínez Ruiz**<br>**Reynaldo Villalonga Santana** | |
| **Cargo:**<br>**Profesora Titular de Universidad**<br>**Profesor Titular de Universidad** | |
| **Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto:**<br>Departamento de Química Orgánica I<br>Facultad de CC Químicas UCM<br>Avda Complutense s/n<br>28040-Madrid | |
| **Teléfono directo**<br>**913944224** | **e-mail**<br>palmarti@ucm.es |


## DATOS DEL PROYECTO

| |
|---|
| **Título: ENSAMBLAJE Y APLICACIONES DE NANOMATERIALES POROSOS FUNCIONALIZADOS CON PUERTAS MOLECULARES** |
| **Breve descripción de los objetivos, contenido del proyecto y tareas a realizar**<br>**Se plantea como objetivo la construcción de nanopartículas porosas, capaces de alojar fármacos u otros cargos en su interior, funcionalizadas con novedosos sistemas de apertura y cierre controlada del poro. Para ello se llevará a cabo la preparación y caracterización de nanomáquinas y nanomotores dotados de puertas (bio)moleculares sensibles a estímulos externos, capaces de liberar selectivamente diferentes reactivos encapsulados y/o realizar tareas de comportamiento cooperativo.**<br>**El proyecto es de carácter multidisciplinar, y contempla todas las fases del proceso, incluyendo la búsqueda bibliográfica, síntesis, caracterización y medidas de funcionalidad.** |
| **Capacidades y conocimientos recomendables que debe tener el estudiante para la realización de este proyecto**<br><br>**El estudiante debe mostrar interés e iniciativa, así como responsabilidad en la asunción de tareas. Se recomienda tener conocimientos en Síntesis orgánica, técnicas de caracterización molecular y estructural, TIC y nivel medio-alto de inglés.** |
| **Indíquese cualquier otra aclaración que se considere que pueda ayudar a los estudiantes en la elección del TFM**<br><br>**El proyecto es de carácter multidisciplinar, abarcando las áreas de Nanotecnología, Biotecnología y Química Orgánica** |

# PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2021-2022

## DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE


| | |
|---|---|
| **Apellidos y nombre del director(es) del proyecto:** Silvia Ortega Gutiérrez / Mar Martín-Fontecha Corrales | |
| **Cargo:** Profesora Titular de Universidad / Profesora Titular de Universidad | |
| **Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto:** Laboratorio de Química Médica, Departamento de Química Orgánica, Universidad Complutense de Madrid | |
| **Teléfono directo:** 913944314 / 913944316 | **e-mail:** siortega@ucm.es / marfont@opt.ucm.es |


## DATOS DEL PROYECTO

| |
|---|
| **Título:** Desarrollo de nuevos compuestos con propiedades bioactivas |
| **Breve descripción de los objetivos, contenido del proyecto y tareas a realizar:**<br>El objetivo global de este proyecto es el desarrollo de nuevos compuestos con actividad en enfermedades carentes de terapias eficaces. Las tareas a realizar dentro de este proyecto incluirán la síntesis de los compuestos de interés y el estudio de su actividad biológica utilizando para ello los modelos in vitro y/o celulares adecuados. |
| **Capacidades y conocimientos recomendables que debe tener el estudiante para la realización de este proyecto:**<br>Técnicas de síntesis, purificación y elucidación estructural de compuestos orgánicos |
| **Indíquese cualquier otra aclaración que se considere que pueda ayudar a los estudiantes en la elección del TFM** |

MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGÁNICA

# PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2021-2022

## DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE


| | |
|---|---|
| **Apellidos y nombre del director(es) del proyecto: Mª Josefa Ortiz García y Antonia Rodríguez Agarrabeitia** | |
| **Cargo: Catedrático de Universidad y Catedrático de Escuela Universitaria** | |
| **Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto: Química Orgánica** | |
| **Teléfono directo**<br>**91 394 4309/5033/6867** | **e-mail: mjortiz@quim.ucm.es**<br>**agarrbe@ucm.es** |


## DATOS DEL PROYECTO

**Título: Síntesis y caracterización de nuevos colorantes orgánicos para aplicaciones biofotónicas**

**Breve descripción de los objetivos, contenido del proyecto y tareas a realizar**

Objetivos: Diseñar y obtener nuevos colorantes orgánicos con absorción y emisión dentro de la ventana biológica (> 650 nm)
Contenido y tareas a realizar:
1. Síntesis de los colorantes.
2. Funcionalización de los esqueletos de colorantes obtenidos previamente, para las diferentes aplicaciones.
3. Aislamiento y caracterización estructural (RMN; MS) de los sistemas obtenidos.
4. Colaboración en los estudios de sus propiedades fotofísicas.
5. Colaboración en los estudios de viabilidad celular y fototoxicidad.
6. Colaboración en los estudios preliminares de sus posibles aplicaciones.

**Capacidades y conocimientos recomendables que debe tener el estudiante para la realización de este proyecto**

Haber cursado y superado las asignaturas de Química Orgánica, Síntesis Orgánica y Determinación estructural. Haber realizado el TFG en un laboratorio de síntesis orgánica.

**Indíquese cualquier otra aclaración que se considere que pueda ayudar a los estudiantes en la elección del TFM**

El grupo está coordinado con otros grupos del CSIC, de la Universidad Autónoma de Madrid, del University College London y de la del País Vasco especialistas en determinación de las propiedades ópticas (láser), cultivos celulares y determinación de las propiedades fotofísicas y generación de oxígeno singlete, respectivamente. En este contexto el estudiante realizará su TFM con una visión claramente multidiscliplinar.

MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGÁNICA

# PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2021-2022

## DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE


| | |
|---|---|
| **Apellidos y nombre del director(es) del proyecto:**<br>Mancheño Real, Mª José y Osío Barcina, José | |
| **Cargo:**<br>Catedráticos de Química Orgánica | |
| **Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto:**<br>Dpto. Química Orgánica, Facultad de Ciencias Químicas, UCM | |
| **Teléfono directo** 913945144 (MJ)/913944236(JO) | **e-mail** mjmreal@ucm.es; **josio@ucm.es** |


## DATOS DEL PROYECTO

| |
|---|
| **Título:** Diseño, síntesis y caracterización de nanomateriales. |
| **Breve descripción de los objetivos, contenido del proyecto y tareas a realizar**<br>The design and preparation of new materials to improve the plasmonic properties of metal nanostructures, such as nanoparticles of Au, Ag and Cu, have emerged as an interesting challenge in the last years. The proposal for this project is based on the synthesis and characterization of porous materials based on organic structures as either potential "smart capsules" for the encapsulation of this type of metallic nanoparticles or as solid support for single-atom catalysts (SACs).<br>Tareas a realizar: Síntesis y caracterización estructural de moléculas orgánicas, síntesis y caracterización de materiales orgánicos. Preparación y caracterización de nanopartículas metálicas con propiedades plasmónicas. |
| **Capacidades y conocimientos recomendables que debe tener el estudiante para la realización de este proyecto**<br>Conocimientos de síntesis orgánica. Interés por la síntesis orgánica en un entorno multidisciplinar |
| **Indíquese cualquier otra aclaración que se considere que pueda ayudar a los estudiantes en la elección del TFM**<br>Proyecto multidisciplinar basado principalmente en síntesis orgánica, y caracterización de nanomateriales y nanopartículas con propiedades plasmónicas. |

MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGÁNICA

# PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2021-2022

## DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE


| | |
|---|---|
| **Apellidos y nombre del director(es) del proyecto:**<br>Osío Barcina, José y Mancheño Real, Mª José | |
| **Cargo:**<br>Catedráticos de Química Orgánica | |
| **Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto:**<br>Dpto. Química Orgánica, Facultad de Ciencias Químicas, UCM | |
| **Teléfono directo:** 913944236(JO)/913945144 (MJM) | **e-mail:** josio@ucm.es; mjmreal@ucm.es |


## DATOS DEL PROYECTO

| |
|---|
| **Título: DISEÑO Y SÍNTESIS DE LIGANDOS ORGÁNICOS TIOLADOS PARA EL AUTOENSAMBLAJE DE NANOPARTÍCULAS DE ORO** |
| **Breve descripción de los objetivos, contenido del proyecto y tareas a realizar**<br>Síntesis de surfactantes tiolados que se han diseñado con el objetivo de estabilizar nanopartículas de oro en disolución acuosa e inducir el autoensamblaje de las mismas mediante interacciones supramoleculares. Los agregados así obtenidos serán utilizados posteriormente para la preparación de nanomateriales de tipo core-shell.<br>Tareas a realizar: Diseño, síntesis y caracterización de moléculas orgánicas. Estabilización de nanopartículas con los ligandos sintetizados y estudio de la agregación de las mismas. Preparación de nanomateriales de tipo core-shell. |
| **Capacidades y conocimientos recomendables que debe tener el estudiante para la realización de este proyecto**<br>Es aconsejable haber cursado las asignaturas Síntesis Orgánica y Química Orgánica Estructural. |
| **Indíquese cualquier otra aclaración que se considere que pueda ayudar a los estudiantes en la elección del TFM**<br>El trabajo se realizará en los laboratorios de los Departamentos de Química Orgánica y Química Física de la Facultad de Ciencias Químicas de la UCM. Por tanto, el trabajo a realizar por el alumno de Máster es multidisciplinar, relacionado con áreas de la Química Orgánica, la Química Supramolecular y la Química Física. La parte relativa a la obtención de las nanopartículas de oro (AuNPs) se llevará a cabo bajo la supervisión del Prof. Andrés Guerrero, del Dto. De Química Física. Puede obtenerse más información consultando las siguientes publicaciones del grupo de investigación: *Nanomaterials* **2018**, *8*, 168; *Isr. J. Chem.* **2016**, *56*, 249; *Angew. Chem. Int. Ed.* **2014**, *53*, 12751. |

# PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2021-2022

## DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE


| | |
|---|---|
| **Apellidos y nombre del director(es) del proyecto:** García Melo, Fátima/ Sánchez Martín, Luis | |
| **Cargo:** Profesor Ayudante Doctor /Catedrático de Universidad | |
| **Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto:** Química Orgánica | |
| **Teléfono directo**<br>913945141 | **e-mail**<br>lusamar@ucm.es |


## DATOS DEL PROYECTO

**Título:** Polimerización supramolecular de sistemas aromáticos. Mecanismos y quiralidad

**Breve descripción de los objetivos, contenido del proyecto y tareas a realizar.** En este Proyecto el alumno/a aplicará técnicas de síntesis orgánica (sustitución electrófila aromática, acoplamientos catalizados por Pd, reacciones de formación de amidas, etc) para obtener moléculas aromáticas elelctroactivas y dotadas con grupos funcionales adecuados para formar polímeros supramoleculares helicoidales (Figura 1). Dichas estructuras supramoleculares serán caracterizadas y estudiadas mediante técnicas ópticas (UV-vis, fluorescencia, dicroísmo circular, etc) y espectroscópicas (RMN, etc). Además, la morfología de los polímeros supramoleculares se estudiará mediante técnicas de microscopía (AFM, SEM, TEM). Una parte muy relevante del proyecto será el estudio de la quiralidad de dichas estructuras supramoleculares.

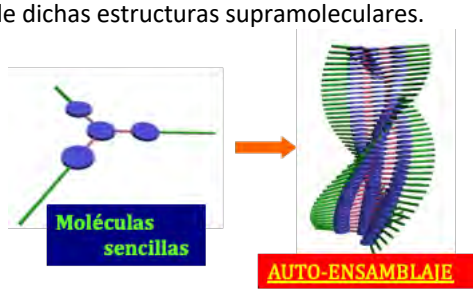



**Figura 1.** Representación esquemática de un proceso de polimerización supramolecular para generar estructuras helicoidales

**Capacidades y conocimientos recomendables que debe tener el estudiante para la realización de este proyecto.** Graduado en química con experiencia en síntesis orgánica y caracterización estructural

**Indíquese cualquier otra aclaración que se considere que pueda ayudar a los estudiantes en la elección del TFM.** El trabajo se realizará en el grupo de investigación Moléculas anfifílicas y polímeros supramoleculares de la UCM (www.ucm.es/supramolecular).

MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGÁNICA

# PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2021-2022

## DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE


| | |
|---|---|
| **Apellidos y nombre del director(es) del proyecto: JOSÉ LUIS SEGURA CASTEDO/MARIA DEL MAR RAMOS GALLEGO** | |
| **Cargo: Catedrático de Universidad/Profesora Titular de Universidad** | |
| **Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto:**<br>Departamento de Química Orgánica. Facultad de Química. Universidad Complutense de Madrid. 28040-Madrid<br>Departamento de Química y Tecnología Ambiental. Universidad Rey Juan Carlos. 28933-Móstoles | |
| **Teléfono directo**<br>913945142/916647465 | **e-mail**<br>segura@ucm.es/mariamar.ramos@urjc.es |


## DATOS DEL PROYECTO

**Título:** Síntesis de materiales orgánicos funcionales basados en unidades electroactivas

**Breve descripción de los objetivos, contenido del proyecto y tareas a realizar**

1.- Los **objetivos** generales del proyecto están encaminados a:

a) El aprendizaje de la metodología a seguir para desarrollar un proyecto de investigación original: búsqueda bibliográfica, diseño, planificación y desarrollo de experimentos, ejecución de los mismos y evaluación y análisis de los resultados obtenidos.

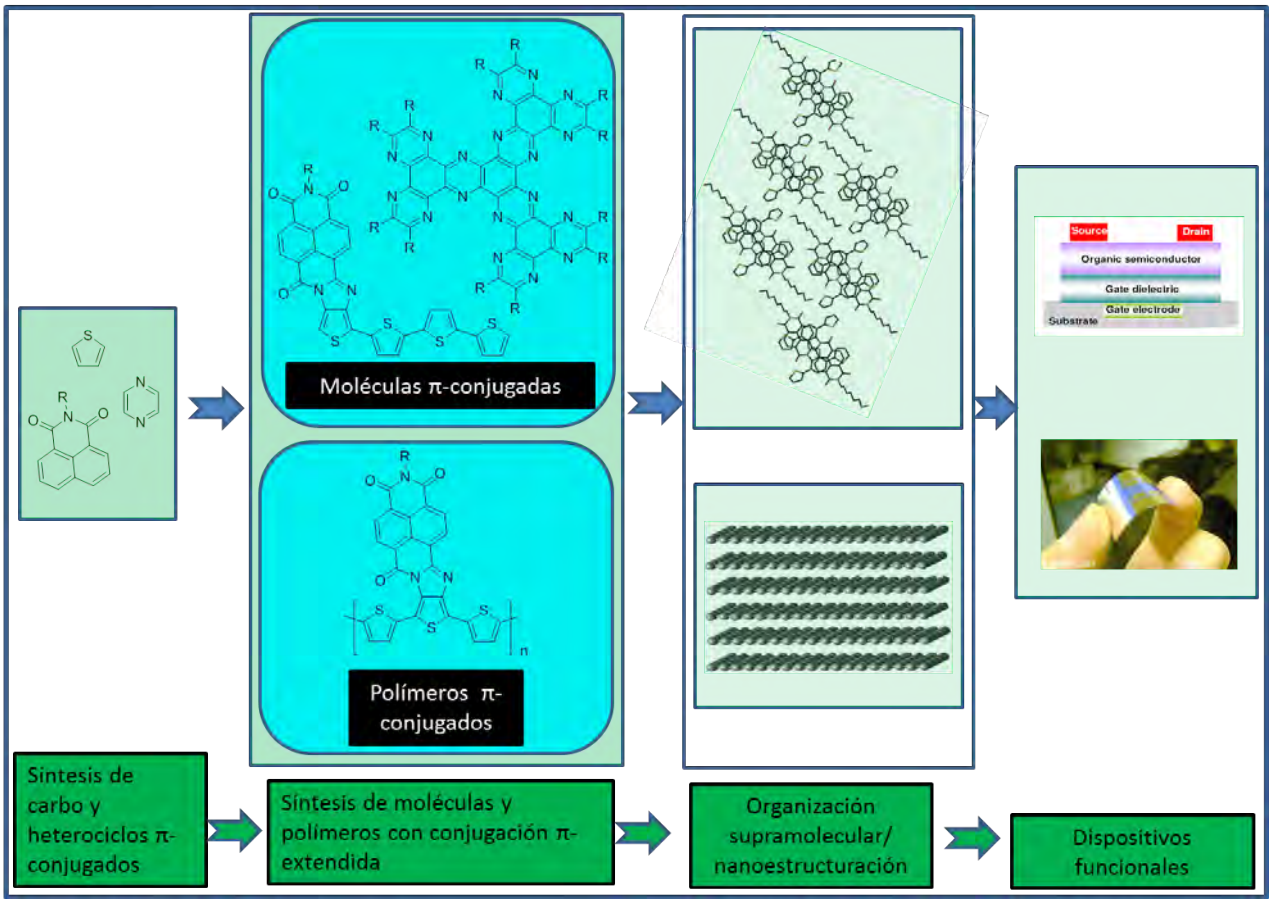
b) Adquirir experiencia en el manejo de las técnicas experimentales de un laboratorio de **síntesis orgánica avanzada**, y la utilización de las **técnicas de caracterización espectroscópicas y espectrométricas** (RMN, espectrometría de masas, espectroscopía IR, análisis elemental) de compuestos orgánicos que hoy día se utilizan en los laboratorios tanto universitarios como en la industria química.

c) Familiarizarse con las técnicas de caracterización específicas para **materiales orgánicos** incluyendo caracterización fotofísica (UV-vis, fluorescencia), electroquímica (voltametría cíclica), térmica (TGA y DSC), de adsorción de gases (isotermas BET) así como mediante microscopía electrónica (SEM y TEM) y de fuerza atómica (AFM).

**2.- Contenido del proyecto**

La variedad de aplicaciones de los compuestos orgánicos es enorme por lo que el campo de la química orgánica tiene interacciones con diferentes áreas incluyendo la química de polímeros, la ciencia de materiales y la nanociencia. Por todo ello, para abordar distintos retos de la sociedad actual, se requieren cada vez más conocimientos de química orgánica en un contexto multidisciplinar para aproximarse a distintas disciplinas como se demuestra por el hecho de que productos obtenidos mediante síntesis orgánica se comercializan, entre otros, en forma de plásticos, como materiales foto y electroactivos para la fabricación de dispositivos electrónicos o como materiales macromoleculares porosos para la adsorción y almacenamientos de gases o su utilización para la fabricación de sensores y nuevos catalizadores.

El presente proyecto está orientado precisamente a la utilización de métodos de síntesis orgánica avanzada para la obtención y nanoestructuración de nuevos materiales orgánicos moleculares y poliméricos con aplicaciones en optoelectrónica y en el desarrollo de redes orgánicas covalentes porosas para su utilización, entre otros, en catálisis, en el desarrollo de sensores, en el almacenamiento de energía y la obtención de nanomateriales bidimensionales laminares alternativos al grafeno.




**3.- Tareas a realizar:**

a) Búsqueda bibliográfica; b) Síntesis de nuevas moléculas y polímeros orgánicos; c) Caracterización espectroscópica y espectrométrica; d) Caracterización de los sistemas sintetizados como materiales orgánicos; e) Aplicabilidad

**Capacidades y conocimientos recomendables que debe tener el estudiante para la realización de este proyecto**

Se requiere tener formación en el área de la síntesis orgánica y la determinación estructural de compuestos orgánicos.

Dado el carácter multidisciplinar del proyecto se requiere alumnos con capacidad para trabajar en grupo interaccionando con investigadores de distintas áreas.

**Indíquese cualquier otra aclaración que se considere que pueda ayudar a los estudiantes en la elección del TFM**

1.- El proyecto está especialmente orientado a aquellos alumnos que deseen adquirir no solo una sólida formación en el área de la **síntesis orgánica avanzada** y caracterización espectroscópica de compuestos orgánicos sino también adquirir conocimientos relacionados con **química aplicada** fundamentalmente en el **área de los materiales orgánicos**.

2.- El proyecto se desarrollará en el seno del **Grupo de materiales orgánicos macromoleculares y heterocíclicos** que desarrolla su actividad investigadora en la frontera entre la síntesis orgánica avanzada, la química macromolecular, el desarrollo de materiales orgánicos foto y/o electroactivos así como de redes orgánicas covalentes porosas con aplicaciones en distintas áreas incluyendo catálisis, sensores, almacenamiento de energía y la obtención de nanomateriales bidimensionales.

**SELECCIÓN DE PUBLICACIONES DEL GRUPO RELACIONADAS CON EL PROYECTO:**

-1.- La fabricación de dispositivos (opto)electrónicos incluyendo células solares orgánicas, transistores de efecto campo y diodos emisores de luz (*J. Mater. Chem. C*, 2021, DOI: 10.1039/D1TC01239H, *Chem. Commun.* 57, 591 (2021), *RSC Adv.*, 11, 2701 (2021), *Electronic Mat.* 2, 222 (2021), *J. Mat. Chem. C* 8, 15277 (2020), *Chem. Eur. J.,* 22, 6374 (2016), *J. Org. Chem.* 81, 11256 (2016), *J. Mater. Chem. C,* 2, 6376 (2014), *Chem. Eur. J.* 19, 12458 (2013), *Chem. Eur. J.,* 18, 532 (2012), *J. Am. Chem. Soc.*, **132**, 8440 (2010)).

-2.- La obtención de nanomateriales laminares derivados del grafeno y de redes orgánicas covalentes (*Polymer* 212, 123273 (2021), *Chem. Commun.*, 56, 1267 (2020), *Chem. Eur. J.* 26, 6495 (2020), *Polymer* 196, 122466 (2020), *Chem. Eur. J.* 25, 12394 (2019), *Chem. Soc. Rev.*, 48, 3903 (2019), *J. Chem. Educ.* 96, 1745 (2019). *Materials*, 12, 1974 (2019), *Chem. Comm.* 54, 8729 (2018); *ACS Catal.* 7, 1015 (2017*), J. Mat. Chem. A* 5, 17973 (2017), *Chem. Soc. Rev.* 45, 5635 (2016), *Chem. Eur. J.* 21, 10666 (2015), *Org. Lett.*, 14, 2798 (2012), *Chem. Eur. J.*, 18, 4965 (2012)).

El grupo de investigación cuenta con estrechas colaboraciones con grupos de investigación nacionales e internacionales que permite no solo desarrollar investigación de interés desde el punto de vista académico sino también desde el punto de vista de las aplicaciones.

# PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2021-2022

## DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE


| | |
|---|---|
| **Apellidos y nombre del director(es) del proyecto:** JOSÉ LUIS SEGURA CASTEDO / FÉLIX ZAMORA ABANADES | |
| **Cargo: Catedrático de Universidad / Catedrático de Universidad** | |
| **Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto:**<br>Departamento de Química Orgánica. Facultad de Química. Universidad Complutense de Madrid. 28040-Madrid<br>Departamento de Inorgánica, Facultad de Ciencias, Universidad Autónoma de Madrid. 28049-Madrid | |
| **Teléfono directo**<br>913945142 / 914973962 | **e-mail**<br>segura@ucm.es / felix.zamora@uam.es |


## DATOS DEL PROYECTO

**Título:** Materiales orgánicos funcionales basados en redes orgánicas covalentes

**Breve descripción de los objetivos, contenido del proyecto y tareas a realizar**

1.- Los **objetivos** generales del proyecto están encaminados a:

a) El aprendizaje de la metodología a seguir para desarrollar un proyecto de investigación original: búsqueda bibliográfica, diseño, planificación y desarrollo de experimentos, ejecución de estos y evaluación y análisis de los resultados obtenidos.

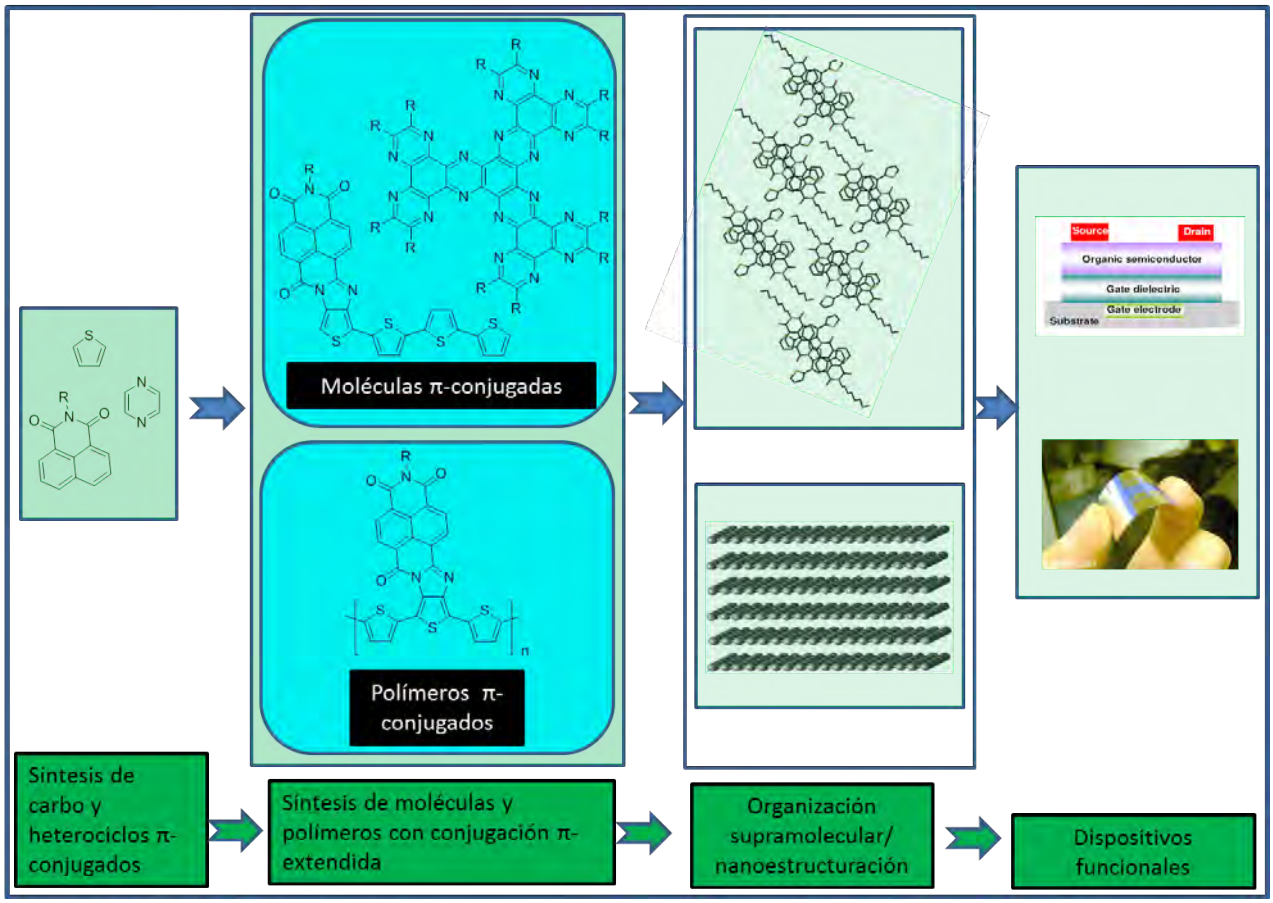
b) Adquirir experiencia en el manejo de las técnicas experimentales de un laboratorio de **síntesis orgánica avanzada**, y la utilización de las **técnicas de caracterización espectroscópicas y espectrométricas** (RMN, espectrometría de masas, espectroscopía IR, análisis elemental) de compuestos orgánicos que hoy día se utilizan en los laboratorios tanto universitarios como en la industria química.

c) Familiarizarse con las técnicas de caracterización específicas para **materiales orgánicos** incluyendo caracterización fotofísica (UV-vis, fluorescencia), electroquímica (voltametría cíclica), térmica (TGA y DSC), de adsorción de gases (isotermas BET) así como mediante microscopía electrónica (SEM y TEM) y de fuerza atómica (AFM).

**2.- Contenido del proyecto**

La variedad de aplicaciones de los compuestos orgánicos es enorme por lo que el campo de la química orgánica tiene interacciones con diferentes áreas incluyendo la química de polímeros, la ciencia de materiales y la nanociencia. Por todo ello, para abordar distintos retos de la sociedad actual, se requieren cada vez más conocimientos de química orgánica en un contexto multidisciplinar para aproximarse a distintas disciplinas como se demuestra por el hecho de que productos obtenidos mediante síntesis orgánica se comercializan, entre otros, en forma de plásticos, como materiales foto y electroactivos para la fabricación de dispositivos electrónicos o como materiales macromoleculares porosos para la adsorción y almacenamientos de gases o su utilización para la fabricación de sensores y nuevos catalizadores.

El presente proyecto está orientado precisamente a la utilización de métodos de síntesis orgánica avanzada para la obtención y nanoestructuración de nuevos materiales orgánicos moleculares y poliméricos con aplicaciones en optoelectrónica y en el desarrollo de redes orgánicas covalentes porosas para su utilización, entre otros, en catálisis, en el desarrollo de sensores, en el almacenamiento de energía y la obtención de nanomateriales bidimensionales laminares alternativos al grafeno.




**3.- Tareas a realizar:**

a) Búsqueda bibliográfica; b) Síntesis de nuevas moléculas y polímeros orgánicos; c) Caracterización espectroscópica y espectrométrica; d) Caracterización de los sistemas sintetizados como materiales orgánicos; e) Aplicabilidad

**Capacidades y conocimientos recomendables que debe tener el estudiante para la realización de este proyecto**

Se requiere tener formación en el área de la síntesis orgánica y la determinación estructural de compuestos orgánicos.

Dado el carácter multidisciplinar del proyecto se requiere alumnos con capacidad para trabajar en grupo interaccionando con investigadores de distintas áreas.

**Indíquese cualquier otra aclaración que se considere que pueda ayudar a los estudiantes en la elección del TFM**

1.- El proyecto está especialmente orientado a aquellos alumnos que deseen adquirir no solo una sólida formación en el área de la **síntesis orgánica avanzada** y caracterización espectroscópica de compuestos orgánicos sino también adquirir conocimientos relacionados con **química aplicada** fundamentalmente en el **área de los materiales orgánicos**.

2.- El proyecto se desarrollará en el seno del **Grupo de materiales orgánicos macromoleculares y heterocíclicos** que desarrolla su actividad investigadora en la frontera entre la síntesis orgánica avanzada, la química macromolecular, el desarrollo de materiales orgánicos foto y/o electroactivos así como de redes orgánicas covalentes porosas con aplicaciones en distintas áreas incluyendo catálisis, sensores, almacenamiento de energía y la obtención de nanomateriales bidimensionales.

**SELECCIÓN DE PUBLICACIONES DEL GRUPO RELACIONADAS CON EL PROYECTO:**

-1.- La fabricación de dispositivos (opto)electrónicos incluyendo células solares orgánicas, transistores de efecto campo y diodos emisores de luz (*J. Mater. Chem. C*, 2021, DOI: 10.1039/D1TC01239H, *Chem. Commun.* 57, 591 (2021), *RSC Adv.*, 11, 2701 (2021), *Electronic Mat.* 2, 222 (2021), *J. Mat. Chem. C* 8, 15277 (2020), *Chem. Eur. J.,* 22, 6374 (2016), *J. Org. Chem.* 81, 11256 (2016), *J. Mater. Chem. C,* 2, 6376 (2014), *Chem. Eur. J.* 19, 12458 (2013), *Chem. Eur. J.,* 18, 532 (2012), *J. Am. Chem. Soc.*, **132**, 8440 (2010)).

-2.- La obtención de nanomateriales laminares derivados del grafeno y de redes orgánicas covalentes (*Polymer* 212, 123273 (2021), *Chem. Commun.*, 56, 1267 (2020), *Chem. Eur. J.* 26, 6495 (2020), *Polymer* 196, 122466 (2020), *Chem. Eur. J.* 25, 12394 (2019), *Chem. Soc. Rev.*, 48, 3903 (2019), *J. Chem. Educ.* 96, 1745 (2019). *Materials*, 12, 1974 (2019), *Chem. Comm.* 54, 8729 (2018); *ACS Catal.* 7, 1015 (2017*), J. Mat. Chem. A* 5, 17973 (2017), *Chem. Soc. Rev.* 45, 5635 (2016), *Chem. Eur. J.* 21, 10666 (2015), *Org. Lett.*, 14, 2798 (2012), *Chem. Eur. J.*, 18, 4965 (2012)).

El grupo de investigación cuenta con estrechas colaboraciones con grupos de investigación nacionales e internacionales que permite no solo desarrollar investigación de interés desde el punto de vista académico sino también desde el punto de vista de las aplicaciones.

# PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL 2021-22 (TFM)

## DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE


| | |
|---|---|
| **Apellidos y nombre del director(es) del proyecto:**<br>Miguel A. Sierra Rodríguez | |
| **Cargo:** Catedrático de Química Orgánica | |
| **Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto:**<br>Departamento de Química Orgánica, Facultad de Ciencias Químicas, UCM. Avda. Complutense s/n. 28040 Madrid | |
| **Teléfono directo**<br>91-3944310 | **e-mail**<br>sierraor@ucm.es |


## DATOS DEL PROYECTO

**Título: SÍNTESIS DE SISTEMAS POLIMETÁLICOS MIMÉTICOS DE HIDROGENASA PARA LA PRODUCCIÓN EFICIENTE DE HIDROGENO**

**Breve descripción de los objetivos, contenido del proyecto y tareas a realizar**

El interés por el estudio de la estructura y modo de acción de los tres tipos de hidrogenasas ([Fe]-hidrogenasas, [NiFe]-hidrogenasas y [FeFe]-hidrogenasas) en la última década se debe a su directa relación con la denominada Química del $H_2$ como Fuente de Energía. Es decir, el almacenamiento de $H_2$(gas) por reducción de protones y la liberación de energía por ruptura del enlace H-H en una célula de combustible. De todas ellas, las [FeFe]-hidrogenasas han sido las más estudiadas, ya que están presentes en numerosos microorganismos anaeróbicos.

El trabajo a desarrollar consiste en la síntesis de diversos complejos polimetálicos con estructura de miméticos de [Fe-Fe]-hidrogenasas y estudio de sus propiedades para la producción de hidrógeno.

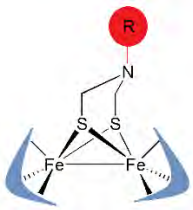



**Figura 1. Estructura de un mimético de [FeFe]-hidrogenasa**

**Capacidades y conocimientos recomendables que debe tener el estudiante para la realización de este proyecto**

Conocimientos básicos de trabajo experimental en química organometálica con buena base teórica en química orgánica y en técnicas espectroscópicas de determinación estructural. El alumno de be tener buena capacidad para el trabajo en equipo, comunicación de resultados y capacidad de adaptación a cambios rápidos en los objetivos perseguidos en función de los resultados.

**Indíquese cualquier otra aclaración que se considere que pueda ayudar a los estudiantes en la elección del TFM**

El grupo de investigación proporciona a sus estudiantes un entorno científico abierto, productivo y dinámico que les permite tener una visión actual e innovadora de la labor investigadora a un alto nivel. Los estudiantes que pasan por nuestros laboratorios obtienen una sólida formación tanto teórica como práctica y son capaces de enfrentarse con un alto grado de éxito al mundo laboral.

# Máster Interuniversitario en Química Orgánica

# Relación de Trabajos de Investigación (30 ECTS) ofertados por Centro de Investigaciones Biológicas Margarita Salas - CSIC

Curso Académico 2021-2022

| Director(es) | Título del Proyecto |
|---|---|
| Martín, S. | Receptores de la inmunidad innata. Química computacional para el estudio del reconocimiento molecular y el diseño de moduladores |
| Pérez, R. | Química adaptativa aplicada al descubrimiento de fármacos |

# PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2021-2022

## DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE


| | |
|---|---|
| **Apellidos y nombre del director(es) del proyecto:** Sonsoles Martín Santamaría | |
| **Cargo:** Científico Titular | |
| **Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto:**<br>Departamento de Biología estructural y Química<br>Centro de Investigaciones Biológicas Margarita Salas, CIB-CSIC<br>C/ Ramiro de Maeztu, 9<br>28040-Madrid<br>www.cib.csic.es | |
| **Teléfono directo:** +34 91 837 3112. Ext. 4389 | **e-mail:** smsantamaria@cib.csic.es |


## DATOS DEL PROYECTO

| |
|---|
| **Título:** "Receptores de la inmunidad innata. Química computacional para el estudio del reconocimiento molecular y el diseño de moduladores" |
| **Breve descripción de los objetivos, contenido del proyecto y tareas a realizar**<br>En nuestro grupo de investigación nos dedicamos al estudio de receptores de la inmunidad innata, en especial receptores Toll-like, lectinas y sistema de Complemento. El TFM estará centrado en el cribado virtual de quimiotecas y diseño de moduladores. Se emplearán técnicas de química computacional y modelado molecular: mecánica cuántica, cribado virtual, docking, simulaciones de dinámica molecular "all atom" y "coarse-grained", simulación de membranas celulares, según sea necesario. |
| **Capacidades y conocimientos recomendables que debe tener el estudiante para la realización de este proyecto**<br>Interés y curiosidad por la visión tridimensional del diseño de fármacos y los estudios mecanísticos y de reconocimiento molecular. Se recomienda gusto por el trabajo con ordenadores. No es necesario tener conocimientos previos de modelado molecular. Se recomienda un nivel de inglés similar al First Certificate. |
| **Indíquese cualquier otra aclaración que se considere que pueda ayudar a los estudiantes en la elección del TFM**<br><br>Colaboramos estrechamente con grupos experimentales para llevar a cabo la síntesis y la evaluación biológica de los compuestos.<br>Las publicaciones del grupo pueden verse aquí:<br>**https://pubmed.ncbi.nlm.nih.gov/?term=Martin-Santamaria+S%5BAuthor%5D+or+Santamaria+SM%5BAuthor%5D&sort=date&size=100** |

MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGÁNICA

# PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2021-2022

## DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE


| | |
|---|---|
| **Apellidos y nombre del director(es) del proyecto:** Pérez Fernández Ruth | |
| **Cargo:** Científico titular | |
| **Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto:** Biología estructural y química, Centro de Investigaciones Biológicas Margarita Salas, CSIC | |
| **Teléfono directo** 918373112 | **e-mail** ruth.perez@csic.es |


## DATOS DEL PROYECTO

| |
|---|
| **Título:** Química adaptativa aplicada al descubrimiento de fármacos |
| **Breve descripción de los objetivos, contenido del proyecto y tareas a realizar**<br>El proyecto se desarrolla en el campo química biológica y aplica la química dinámica combinatoria al descubrimiento de fármacos.<br>Se basa en el diseño y la síntesis de compuestos orgánicos sencillos que en presencia de una proteína reaccionan entre sí formando compuestos con afinidad por la proteína diana. La capacidad de autocorrección de los compuestos formados en presencia de la proteína consigue la formación casi exclusiva de compuestos con afinidad por la misma. Estos moduladores son identificados y aislados para estudiar las interacciones con la proteína de interés. |
| **Capacidades y conocimientos recomendables que debe tener el estudiante para la realización de este proyecto**<br>Entre las tareas a realizar por el estudiante de máster se encuentran: la síntesis de compuestos, el uso del HPLC-MS y de distintas técnicas biofísicas para el estudio de la interacciones ligando-proteína. |
| **Indíquese cualquier otra aclaración que se considere que pueda ayudar a los estudiantes en la elección del TFM**<br>Publicaciones relacionadas con el trabajo:<br>-Canal-Martín, A. *et al.* "Insights into real-time chemical processes in a calcium sensor protein-directed dynamic library" *Nature Commun.* 2019*, 10*, 2798. DOI: 10.1038/s41467-019-10627-w<br>-Canal-Martín, A. *et al.* "Protein-directed dynamic combinatorial chemistry: an efficient strategy in drug design" *ACS Omega* 2020, 5, 26307-26315. |

**PROPUESTAS DEL INSTITUTO IMDEA ENERGÍA**

| Director(es) | Título del Proyecto |
|---|---|
| MARCILLA, REBECA / PATIL, NAGARAJ | *Synthesis of innovative redox-active conjugated porous polymers and their application in advanced organic batteries* |
| LIRAS TORRENTE, MARTA / NARANJO SÁNCHEZ, TERESA | *Diseño y síntesis de nuevos polímeros conjugados porosos* |
| GÓMEZ MENDOZA, MIGUEL / DE LA PEÑA, VICTOR | *Procesos fotoquímicos en cascada para llevar a cabo reacciones en química orgánica.* |

MASTERQO
MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGÁNICA

# PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2021-2022

## DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE


| | |
|---|---|
| **Apellidos y nombre del director(es) del proyecto:** Marcilla Rebeca and Patil Nagaraj | |
| **Cargo:** Senior researcher (RM) and postdoctoral researcher (NP) | |
| **Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto:** Electrochemical processes unit, IMDEA energy institute, Avda. Ramón de la Sagra, 3, Mostoles- 28935, Madrid | |
| **Teléfono directo**<br>917371131 | **e-mail**<br>.ebeca.marcilla@imdea.org and nagaraj.patil@imdea.org |

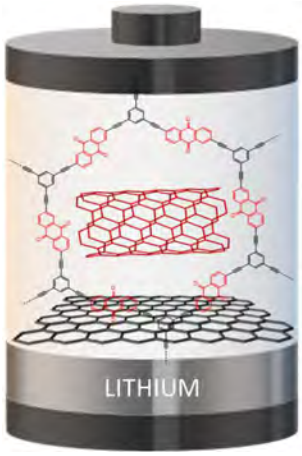

## DATOS DEL PROYECTO

**Título:** Synthesis of innovative redox-active conjugated porous polymers and their application in advanced organic batteries

**Breve descripción de los objetivos, contenido del proyecto y tareas a realizar**

Redox-active polymer (RAP)-based organic electrode materials are promising candidates for the development of "next-generation" safer, cheaper, and sustainable batteries. To this end, numerous RAPs have been effectively applied in different battery technologies, but most of them are based on linear/cross-linked polymers (1). Recently, redox-active conjugated porous polymer-based organic electrodes are gathering renowned interest in the field of energy storage owing to their extended π-conjugation with inherent 3D microporosity, but their development is still in early days (2). In this project, we aim to develop such batteries, targeting their electrochemical performance beyond "state-of-the-art".

**The main objectives of this project are:**
1. Synthesis of conjugated porous polymers incorporating various redox-active building blocks such as quinones/nitroxide radicals/imides/carboxylates. etc. by different coupling reactions (for instance, Sonogashira cross-coupling reaction).
2. Physico–chemical and morphological characterization of polymers using relevant analytical techniques.
3. Fundamental electrochemical characterization of polymers by cyclic voltammetry and galvanostatic experiments.
4. Assembling and testing of various batteries (metal (Li, Zn)-polymer, polymer-air and all-polymer, etc.) (3)




Example of anthraquinone-based conjugated porous polymer and reduced graphene oxide/multi-walled carbon nanotube hybrid organic cathode for Li-ion battery (2b)

In the frame of different National and European projects, our unit at IMDEA ENERGÍA is consolidating organic synthesis group, and constantly looking for students interested in organic synthesis and characterization. As the outcome of this training, the student will get opportunity to learn about organic synthesis, different polymerization methods, various characterization techniques, basics of electrochemistry, and device fabrication and testing.

**References:**

(1) Chem. Rev. 2016, 116 (16), 9438–9484. (2a) Adv. Funct. Mater. 2020, 30 (6), 1908074, (2b) ACS Energy Lett. 2020, 2945–2953. (3a) J. Mater. Chem. A, 2021,9, 505-514, (3b) Adv. Energy Mater. 2021, 2100939.

**Capacidades y conocimientos recomendables que debe tener el estudiante para la realización de este proyecto**

For the smooth progress of the project, it is recommended to have student with the knowledge in organic synthesis, structural elucidation through physico-chemical characterization techniques, etc. Fluent communication in English is necessary since we are a multicultural group with people from different nationalities.

**Indíquese cualquier otra aclaración que se considere que pueda ayudar a los estudiantes en la elección del TFM**

If he/she knows the basics of polymer synthesis and characterization would be ideal, but not mandatory

MASTERQO
MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGÁNICA

# PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL 2021-22 (TFM)

## DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE


| | |
|---|---|
| **Apellidos y nombre del director(es) del proyecto:**<br>LIRAS TORRENTE, MARTA; NARANJO SÁNCHEZ, TERESA | |
| **Cargo:**<br>INVESTIGADOR TITULAR; INVESTIGADOR POSTDOCTORAL | |
| **Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto:**<br>Unidad de Procesos Fotoactivados, IMDEA ENERGÍA, Parque tecnológico de Móstoles, c/ Ramón de la Sagra, 3 28935 Móstoles MADRID | |
| **Teléfono directo**<br>**917371120 ext 105** | **e-mail**<br>marta.liras@imdea.org; teresa.naranjo@imdea.org |


## DATOS DEL PROYECTO

**Título: Diseño y síntesis de nuevos polímeros conjugados porosos**

**Breve descripción de los objetivos, contenido del proyecto y tareas a realizar**

Los polímeros conjugados porosos (Conjugated Porous Polymers, CPPs y Covalent Organic Frameworks, COFs) representan una nueva generación de polímeros siendo una de sus aplicaciones más interesantes su empleo como fotocatalizadores heterogéneos. Estos materiales exhiben un gran número de propiedades interesantes como son propiedades semiconductoras, altas termo y fotoestabilidades, absorción en una amplia región del espectro solar y una gran versatilidad química en comparación con los semiconductores inorgánicos.

La naturaleza de los *building block* usados como elementos de partida para su síntesis, determinan sus propiedades físico-químicas finales, pudiendo no sólo modular su área superficial sino también sus propiedades optoelectrónicas que, en última instancia, determinan su aplicabilidad en el campo de la Fotocatálisis.

En este TFM se llevará a cabo el diseño y síntesis de diferentes *building block* para la preparación de nuevos CPPs y COFs. Los *building block* serán seleccionados en función de sus propiedades químicas y fotofísicas para así poder modular las propiedades finales de los materiales en cuestión. Dependiendo del grado de dificultad de la síntesis de esos building block se llegará a cabo la preparación de los polímeros correspondientes y su evaluación como fotocatalizadores heterogéneos. En el grupo de investigación tenemos experiencia diseño y síntesis de CPPs, así como materiales híbridos basados en ellos, utilizados en procesos de fotosíntesis artificial como son la producción de hidrógeno a partir de agua o la fotoreducción de $CO_2$ (para más aclaración ver, por ejemplo, C. G. López-Calixto et al, *ACS Catal*. **2020**, *10*, 9804-9812; L. Collado *et al.* Adv. Functional Mater. **2021** (in press), respectivamente). Por otro lado, también contamos con experiencia en el empleo de estos CPPs como fotocatalizadores en procesos de química fina (ver, por ejemplo, C. G. López-Calixto et al. **2019**, 117933)

**Capacidades y conocimientos recomendables que debe tener el estudiante para la realización de este proyecto**

Para el buen desarrollo de este proyecto el perfil recomendable es el de una persona con conocimientos en síntesis orgánica y todas aquellas capacidades relacionadas como son elucidación estructural, caracterización físico-química, etc.

**Indíquese cualquier otra aclaración que se considere que pueda ayudar a los estudiantes en la elección del TFM**

El desarrollo de este TFM se engloba dentro un proyecto Europeo (H2020) FET-Proactiva denominado HYSOLCHEM así como un proyecto nacional financiado por la AEI, denominado NHympha. La unidad de procesos fotoactivados cuenta con los recursos económicos suficientes para la puesta en marcha del trabajo propuesto.

MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGÁNICA

# PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2021-2022

## DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE


| | |
|---|---|
| **Apellidos y nombre del director(es) del proyecto: Dr. Miguel Gómez Mendoza y Dr. Víctor de la Peña (o en su ausencia Dra. Marta Liras)** | |
| **Cargo: Miguel Gómez Mendoza: Investigador postdoctoral**<br>**Víctor de la Peña: Investigador jefe de la unidad**<br>**Marta Liras Torrente: Investigadora jefa de la unidad** | |
| **Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto:**<br>**Instituto IMDEA Energía, Unidad de Procesos Fotoactivados, Av. Ramón de la Sagra 3, 28935, Móstoles, Madrid** | |
| **Teléfono directo**<br>**917371120** | **e-mail**<br>miguel.gomez@imdea.org |


## DATOS DEL PROYECTO

| |
|---|
| **Título: Procesos fotoquímicos en cascada para llevar a cabo reacciones en química orgánica.** |
| **Breve descripción de los objetivos, contenido del proyecto y tareas a realizar:**<br><br>**Los procesos fotoquímicos permiten llevar a cabo reacciones orgánicas tras la activación de un fotosensibilizador (FS) a través de la luz. Desde procesos de absorción-emisión, transferencia de carga y energía o incluso, a través de procesos *up-conversion*, la fotoquímica está presente en múltiples aplicaciones en bio-detección, fototerapia o fotocatálisis.**<br>**El objetivo principal del proyecto final de master es determinar mediante técnicas fotofísicas, tales como fluorescencia y fotólisis de destello láser, los mecanismos involucrados en procesos fotoquímicos en cascada; para posteriormente, llevar a cabo reacciones de interés en química orgánica.**<br><br>**Para ello, en primer lugar, se requerirá la síntesis y preparación de sensibilizadores adecuados que puedan absorber eficientemente luz en la región UV-visible del espectro. Posteriormente, se caracterizarán tanto estructural como fotofisicamente los FS seleccionados y/o preparados.**<br>**Una vez caracterizados los sistemas fotoactivos, se llevarán a cabo reacciones de interés en química orgánica y se identificarán los procesos fotofísicos que gobiernan estas transformaciones químicas.** |
| **Capacidades y conocimientos recomendables que debe tener el estudiante para la realización de este proyecto**<br>**1- Conocimiento en síntesis orgánica, así como en elucidación estructural (resonancia magnética nuclear e infrarrojo).**<br>**2- Conocimiento general de procesos fotofísicos (absorción, emisión y fosforescencia).**<br>**3- Recomendable conocimiento general en el uso de espectrofotometría de absorción UV-visible y fluorescencia.** |
| **Indíquese cualquier otra aclaración que se considere que pueda ayudar a los estudiantes en la elección del TFM** |

# Máster Interuniversitario en Química Orgánica

# Relación de Trabajos de Investigación (30 ECTS) ofertados por IMDEA Nanociencia

Curso Académico 2021-2022

| Director(es) | Título del Proyecto |
|---|---|
| García, I. y Martín, N. | Estudio de la influencia de espaciadores orgánicos en el funcionamiento de células solares de perovskita |
| Martín, N. y Urieta, J. | Síntesis de sistemas conjugados orgánicos basados en nanografenos para su aplicación como materiales transportadores de carga en células solares de Perovskita |

MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGÁNICA

# PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2021-2022

## DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE


| | |
|---|---|
| **Apellidos y nombre del director(es) del proyecto:**<br>García Benito, Inés y Martín León, Nazario | |
| **Cargo:**<br>Personal docente investigador de la Universidad Complutense de Madrid (UCM); Catedrático en Química Orgánica en la UCM | |
| **Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto:**<br>IMDEA Nanociencia. Calle Faraday, 9 28049 Madrid | |
| **Teléfono directo**<br>91 299 88 19 | **e-mail**<br>ingarc10@ucm.es |


## DATOS DEL PROYECTO

| |
|---|
| **Título:** Estudio de la influencia de espaciadores orgánicos en el funcionamiento de células solares de perovskita. |
| **Breve descripción de los objetivos, contenido del proyecto y tareas a realizar**<br>Entre los objetivos principales de este proyecto, destaca la preparación de células solares basadas en perovskita, campo de gran actualidad y fructífera investigación en la comunidad científica. También se estudiará la influencia de distintos espaciadores orgánicos en el funcionamiento y estabilidad de los dispositivos. Para ello, se desarrollará un proceso de aprendizaje y optimización en la fabricación de las celdas, así como la síntesis de dichos cationes orgánicos. |
| **Capacidades y conocimientos recomendables que debe tener el estudiante para la realización de este proyecto**<br>Se valorará una buena capacidad de organización y optimización del tiempo. Se apreciará la habilidad de trabajar en el laboratorio de forma ordenada, cuidadosa y reproducible, así como la capacidad creativa. Disponer de conocimiento en química/física e inglés serán requeridos. |
| **Indíquese cualquier otra aclaración que se considere que pueda ayudar a los estudiantes en la elección del TFM**<br>El laboratorio en que se desarrollará este proyecto es nuevo y complemente equipado para la preparación de dispositivos solares. En este mismo centro, el grupo dispone además de un laboratorio de síntesis orgánica. |

MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGÁNICA

# PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2021-2022

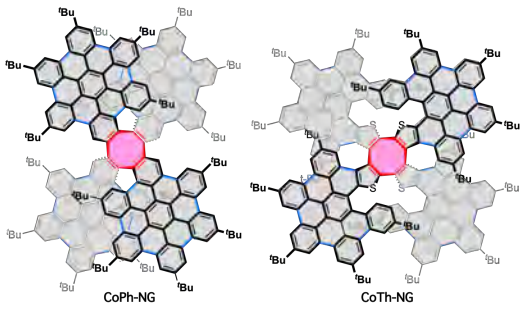
## DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE


| | |
|---|---|
| **Apellidos y nombre del director(es) del proyecto:** Martín León, Nazario / Urieta Mora, Javier | |
| **Cargo:** Catedrático de Universidad / Investigador Postdoctoral Contratado | |
| **Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto:** IMDEA-Nanociencia. C/ Faraday 9. Ciudad Universitaria de Cantoblanco. 28049 Madrid | |
| **Teléfono directo:** 913944227 (Nazario Martín); 912998836 (Javier Urieta) | **e-mail:** nazmar@ucm.es; j.urieta@ucm.es |


## DATOS DEL PROYECTO

**Título:** Síntesis de sistemas conjugados orgánicos basados en nanografenos para su aplicación como materiales transportadores de carga en células solares de Perovskita

**Breve descripción de los objetivos, contenido del proyecto y tareas a realizar**




En este proyecto de TFM se combinan dos de los temas de investigación más importantes en la actualidad en el ámbito científico como son las células solares de Perovskita (PSCs) y la síntesis de nanografenos moleculares. En este sentido, el carácter semiconductor de los materiales nanográfenicos les confiere un amplio abanico de aplicaciones como, por ejemplo, su uso como capas transportadores de carga, ya sea de huecos o electrones, que son uno de los componentes más estudiados en las células solares de Perovskita. Desde el descubrimiento de este tipo de células solares en 2009, la comunidad científica ha conseguido grandes mejoras en diferentes aspectos como su eficiencia de conversión de luz solar (del 25% actualmente, similar a las células basadas en silicio), sus métodos de fabricación o su estabilidad.

Durante el proyecto de TFM se llevarán a cabo la síntesis de materiales de tipo nanografeno siguiendo una metodología "bottom-up" que permite introducir la funcionalización deseada en estos sistemas. Posteriormente se estudiarán las propiedades optoelectrónicas de los sistemas sintetizados y se realizará, si es posible, su incorporación como capas transportadores de carga en células solares de Perovskita en colaboración con el laboratorio de energía fotovoltaica en IMDEA Nanociencia.

Publicaciones recientes en la línea de trabajo propuesta:


1. J. M. Fernández-García, P. J. Evans, S. Filippone, M. A. Herranz, N. Martín, *Acc. Chem. Res.* **2019**, *52*, 1565-1574

2. J. Urieta-Mora, A. Molina-Ontoria, N. Martín *et al.*, *J. Am. Chem. Soc.* **2020**, *142*, 4162−4172

3. J. Urieta-Mora, I. García-Benito, A. Molina-Ontoria, N. Martín, *Chem. Soc. Rev.* **2018**, *47*, 8541-8571


**Capacidades y conocimientos recomendables que debe tener el estudiante para la realización de este proyecto**

Se precisan los conocimientos de un graduado en química, con interés por la síntesis de moléculas y en la preparación de nanomateriales orgánicos. Es importante la capacidad de trabajo en equipo y la disposición para el aprendizaje de diferentes técnicas instrumentales que complementarán su formación.

**Indíquese cualquier otra aclaración que se considere que pueda ayudar a los estudiantes en la elección del TFM**

El trabajo de investigación se llevará a cabo en el Grupo de Materiales Moleculares Orgánicos de la UCM dirigido por el Catedrático Nazario Martín (http://nazariomartingroup.com/) que además dispone de un laboratorio en IMDEA-Nanociencia (Campus de la UAM), grupo de referencia en el área de investigación en la que se enmarca esta propuesta. El Proyecto/Trabajo de Fin de Máster, permitirá al estudiante formarse dentro de un laboratorio multidisciplinar enfocado en la síntesis química orgánica dentro de un equipo altamente competitivo a nivel tanto nacional como internacional.

## PROPUESTAS DEL INSTITUTO DE CIENCIA DE MATERIALES DE MADRID (ICMM, CSIC)

| Apellidos y nombre del director (es) | Título del Proyecto |
|---|---|
| **Levy Cohen, David** | Caracterización de materiales Sol-Gel nano-porosos para optimizar la sensibilidad en su respuesta como nanosensores ópticos. |
| **Montero Herrero, Isabel** | Métodos químicos para tratar la superficie de los dispositivos embarcados en satélites espaciales |
| **Gómez Lor, Berta**<br>**Uddin, M. Afsar** | Semiconductores Orgánicos basados en Benzotiadiazol y sus aplicaciones como fotocatalizadores para Remediación Ambiental |
| **Iglesias Hernández, Marta** | Materiales orgánicos porosos con unidades singulares para aplicaciones catalíticas |
| **García Frutos, Eva María** | Preparación de nuevas moléculas orgánicas multifuncionales para su futura aplicación en OLEDs o células solares orgánicas |

MASTERQO
MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGÁNICA

# PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2021-2022

## DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE


| | |
|---|---|
| **Apellidos y nombre del director(es) del proyecto:**<br>Levy Cohén, David | |
| **Cargo:**<br>Profesor de Investigación, Responsable Grupo Sol-Gel | |
| **Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto:**<br>Materiales Fotónicos, Instituto de Ciencia de Materiales de Madrid-ICMM. CSIC, Campus Cantoblanco | |
| **Teléfono directo**<br>913004654 | **e-mail**<br>David.Levy@icmm.csic.es |


## DATOS DEL PROYECTO

| |
|---|
| **Título:**<br>Caracterización de materiales Sol-Gel nano-porosos para optimizar la sensibilidad en su respuesta como nanosensores ópticos. |
| **Breve descripción de los objetivos, contenido del proyecto y tareas a realizar**<br>Una de las ventajas más importantes del procesamiento Sol-Gel es su capacidad de controlar las propiedades estructurales de los micro/nanoporos de su matriz en términos de tamaño, forma y densidad de poros ya que estas definen sus principales propiedades. En nuestro caso, para el desarrollo de un sensor óptico, las micro / nano-dimensiones de los poros, así como la distribución de poros, tienen una influencia muy importante en la superficie efectiva sobre la cual se confinan moléculas fluorescentes para que puedan mostrar una respuesta óptica adecuada a un estimulo externo. Se pretende sintetizar materiales porosos y optimizar las propiedades morfológicas y estructurales de materiales Sol-Gel para aumentar su sensibilidad y obtener una mejor respuesta óptica de los nanosensores. |
| **Capacidades y conocimientos recomendables que debe tener el estudiante para la realización de este proyecto**<br>Conocimientos en química, manejo de SW básico |
| **Indíquese cualquier otra aclaración que se considere que pueda ayudar a los estudiantes en la elección del TFM**<br>Se aprenderá a utilizar técnicas de síntesis Sol-Gel y preparación de recubrimientos.<br>Se aprenderá a utilizar técnicas de caracterización de materiales como: Microscopía óptica, rugosimetría y perfilometría, microscopía electrónica de barrido (SEM), otras. |

# PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2021-2022

## DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE


| | |
|---|---|
| **Apellidos y nombre del director(es) del proyecto:**<br>**ISABEL MONTERO HERRERO** | |
| **Cargo:**<br>**PROFESOR DE INVESTIGACIÓN** | |
| **Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto:**<br><br>INSTITUTO **DE CIENCIA DE MATERIALES DE MADRID. CSIC. c/ Sor Junan Inés de la Cruz 3. 28049-Madrid** | |
| **Teléfono directo**<br>**913349085** | **e-mail**<br>**imontero@icmm.csic.es** |


## DATOS DEL PROYECTO

| |
|---|
| **Título: Métodos químicos para tratar la superficie de los dispositivos embarcados en satélites espaciales** |
| **Breve descripción de los objetivos, contenido del proyecto y tareas a realizar**<br><br>**Los dispositivos de radiofrecuencia embarcados en satélites espaciales requieren ser recubiertos con metales nobles para mejorar su funcionamiento. En este TFM se depositará plata y oro mediante métodos químicos sobre la aleación de alumnio AA6082 utilizada en la industria espacial. Es novedoso la utilización de líquidos iónicos en lugar de agua en las disoluciones. Además, la morfología de las muestras se estudiará mediante microscopía electrónica de barrido. También se aprenderán y utilizarán técnicas espectroscópicas que requieren ultra-alto vacío como espectroscopia de fotoemisión de rayos x (XPS) para obtener la composición química y los estados de oxidación.**<br><br>**Tareas a realizar:**<br>**- Depósito de plata y oro en liquidos iónicos sobre sustratos de aleaciones de alumin..**<br>**- Caracterización de las muestras:**<br>**Técnicas espectroscopicas de ultra-alto vacío como XPS, gravimetría, microscopia electrónica de barrido, test de adhesión, entre otros.** |
| **Capacidades y conocimientos recomendables que debe tener el estudiante para la realización de este proyecto**<br><br>- **Conocimietos de química general, química orgánica.** |
| **Indíquese cualquier otra aclaración que se considere que pueda ayudar a los estudiantes en la elección del TFM**<br><br>**Aprenderá y utilizará técnicas de preparación de muestras y de análisis de máxima actualidad para la industria, muy en especial para a industria espacial y aeroespacial.** |

MASTERQO
MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGÁNICA

# PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2021-2022

## DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE


| | |
|---|---|
| **Apellidos y nombre del director(es) del proyecto:**<br>Berta Gómez-Lor Pérez y M. Afsar Uddin | |
| **Cargo:** Investigadora científica | |
| **Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto:**<br>Nuevas Arquitecturas en Química de Materiales | |
| **Teléfono directo**<br>913349031 | **e-mail**<br>bgl@icmm.csic.es |


## DATOS DEL PROYECTO

**Título:** Semiconductores Orgánicos basados en Benzotiadiazol y sus aplicaciones como fotocatalizadores para Remediación Ambiental

**Breve descripción de los objetivos, contenido del proyecto y tareas a realizar**

Este proyecto plantea el desarrollo de nuevo semiconductores orgánicos como fotocatalizadores para aplicaciones en remediación ambiental basados en la molécula de benzotiadiazol, molécula con interesantes propiedades semiconductoras tipo n y actividad fotocatalítica. Inicialmente se plantea la síntesis de una serie de benzotiadiazoles sustituidos con grupos con distinta naturaleza electrónica con el fin de sintonizar sus propiedades optoelectrónicas y su subsecuente funcionalización con grupos capaces de establecer interacciones no-covalentes direccionales
En una segunda etapa y con el fin de pasar de la molécula al material, se inducirá el autoensamble mediante estímulos externos. Los nuevos materiales serán investigados en procesos de fotodegradación de contaminantes orgánicos emergentes.

**Capacidades y conocimientos recomendables que debe tener el estudiante para la realización de este proyecto**
Conocimientos de síntesis y caracterización de compuestos orgánicos

**Indíquese cualquier otra aclaración que se considere que pueda ayudar a los estudiantes en la elección del TFM**
Este proyecto multidisciplinar permitirá al estudiante a la investigación científica incorporarse en un grupo de investigación establecido en un centro competitivo y altamente interdisciplinar.
Se espera que el estudiante además de adquirir experiencia en síntesis y caracterización de molecular orgánicas , se familiarice con las técnicas habituales de caracterización de materiales orgánicos autoesamblados (materiales cristalinos, cristales líquidos..).

MASTERQO
MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGÁNICA

# PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2021-2022

## DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE


| | |
|---|---|
| **Apellidos y nombre del director(es) del proyecto: Marta Iglesias Hernández** | |
| **Cargo: Investigador Científico** | |
| **Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto:**<br>**Dpto de Nuevas arquitecturas en Química de Materiales, Instituto de Ciencia de Materiales de Madrid. CSIC. Cantoblanco**<br>**C/ Sor Juana Inés de la Cruz, nº 3, 28049 Madrid.** | |
| **Teléfono directo: 913349032** | **e-mail: marta.iglesias@icmm.csic.es** |


## DATOS DEL PROYECTO

**Título: Materiales orgánicos porosos con unidades singulares para aplicaciones catalíticas**

**Breve descripción de los objetivos, contenido del proyecto y tareas a realizar**

El diseño y la preparación de nuevos materiales con propiedades definidas (catalíticas y tecnológicas) que combinen unidades estructurales singulares normalmente no utilizadas en la preparación de catalizadores convencionales, es esencial para la obtención de sólidos selectivos y multi-funcionales. La organización de estos sólidos porosos formando entramados estructurales bi- y/o tridimensionales con funcionalidades seleccionadas es un factor clave para la síntesis de materiales avanzados difíciles de obtener mediante técnicas convencionales. La combinación adecuada de precursores o unidades moleculares orgánicas modificadas (unidades de construcción a escala nanométrica) dará lugar a la formación de redes porosas con centros activos en posiciones concretas de la estructura.

El proyecto está dirigido al diseño de materiales porosos basados en plataformas moleculares que incorporen centros en su estructura que podrán ser utilizados como catalizadores en diferentes procesos.

La introducción de grupos fotoactivos en la estructura dará lugar a materiales que se usarán en procesos fotocatalíticos (reducción y formilación de $CO_2$, reacciones de oxidación de diferentes sustratos de interés en química orgánica, descomposición de agua, etc.). Los objetivos se abordarán de manera multidisciplinar desde el diseño y la síntesis de las unidades de construcción con características singulares a la preparación de los materiales porosos y el estudio de sus propiedades físico-químicas. Los procesos se llevarán a cabo de manera sostenible utilizando métodos no convencionales (activación por microondas, procesos fotocatalíticos) que favorecerán rutas de producción sostenibles con importantes ventajas desde un punto de vista económico, medio ambiental y energético.

.-Se realizará la síntesis de las unidades que serán utilizadas para construir el material,

.- Se llevará a cabo la síntesis de los materiales mediante diferentes combinaciones de las unidades descritas previamente

.-Se caracterizará a nivel molecular y del sólido

.- Finalmente, se hará un estudio de su posible actividad como catalizadores de transformaciones relevantes en química orgánica. Se llevarán a cabo reacciones fotocatalizadas modelo y se estudiará su reciclabilidad.

**Capacidades y conocimientos recomendables que debe tener el estudiante para la realización de este proyecto**

Conocimientos de síntesis y caracterización obtenidos en el Grado y Máster

**Indíquese cualquier otra aclaración que se considere que pueda ayudar a los estudiantes en la elección del TFM**

Los estudiantes desarrollarán autonomía en el laboratorio con el manejo de los diferentes equipos de síntesis y caracterización existentes en el laboratorio (hornos microondas, difracción de rayos x, resonancia magnética nuclear, cromatógrafos gases-masas, HPLC, etc)

MASTERQO
MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGÁNICA

# PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2021-2022

## DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE


| | |
|---|---|
| **Apellidos y nombre del director(es) del proyecto:**<br>Eva M. García Frutos | |
| **Cargo:**<br>Científico Titular | |
| **Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto:**<br>Nuevas Arquitecturas en Química de Materiales | |
| **Teléfono directo**<br>**913349038** | **e-mail**<br>emgfrutos@icmm.csic.es |


## DATOS DEL PROYECTO

| |
|---|
| **Título: Preparación de nuevas moléculas orgánicas multifuncionales para su futura aplicación en OLEDs o células solares orgánicas.** |
| **Breve descripción de los objetivos, contenido del proyecto y tareas a realizar**<br><br>**Preparación de nuevos materiales orgánicos multifuncionales con diferentes aplicaciones dentro de la electrónica y/o fotónica orgánica. Se realizarán síntesis, preparación y caracterización de nuevas moléculas orgánicas. Se profundizará en diferentes métodos de síntesis y purificación de estos. Se realizaran estudios básicos de la caracterización de materiales mediante técnicas básicas en química orgánica como RMN de $^{1}H$ y $^{13}C$ , IR (ATR)... Se estudiarán los nuevos compuestos mediante espectrometría de absorción y emisión en disolución y en estado sólido de los diferentes compuestos. Por otra parte, también se realizarán técnicas más especializadas como microscopia óptica polarizada, voltametría cíclica, microscopia electrónica y difracción de rayos X en polvo.** |
| **Capacidades y conocimientos recomendables que debe tener el estudiante para la realización de este proyecto**<br>**Conocimientos en Química Orgánica y en elucidación estructural de moléculas orgánicas** |
| **Indíquese cualquier otra aclaración que se considere que pueda ayudar a los estudiantes en la elección del TFM**<br><br>**El master se realizaría en el Instituto de Ciencia de Materiales de Madrid (ICMM, CSIC), Campus de Cantoblanco (UAM), https://www.icmm.csic.es/. Para más información en la página del grupo de imvestigación, http://www.icmm.csic.es/phbhmg/** |

# PROPUESTAS DEL INSTITUTO DE QUÍMICA MÉDICA (IQM, CSIC)

| Apellidos y nombre del director (es) | Título del Proyecto |
|---|---|
| **Dardonville, Christophe** | **Búsqueda de nuevos fármacos antiparasitarios para enfermedades desatendidas (leishmaniosis, enfermedad de Chagas, enfermedad del sueño)** |
| **González Muñiz, Rosario** | **COVID-19: buscando soluciones desde la química médica** |
| **Sánchez Sancho, Francisco** | **Síntesis orgánica de nuevos compuestos con actividad antiinflamatoria** |
| **Quesada del Sol, Ernesto** | **Inhibidores de enterovirus 71 (EV71): explorando el acceso al bolsillo hidrofóbico de VP1 como diana terapéutica ampliada** |
| **Pérez Pérez, María Jesús** | Antivirales frente al SARS-CoV-2: frenar la infección viral mediante el diseño y síntesis de inhibidores de entrada |

# PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL 2021-22 (TFM)

## DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE


| | |
|---|---|
| **Apellidos y nombre del director(es) del proyecto:** CHRISTOPHE DARDONVILLE | |
| **Cargo:** CIENTÍFICO TITULAR | |
| **Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto:**<br>Instituto de Química Médica / Consejo Superior de Investigaciones Científicas (IQM-CSIC)<br>C/ Juan de la Cierva, 3<br>28006 MADRID | |
| **Teléfono directo**<br>912587490<br>http://www.iqm.csic.es/antiparasitarios.html | **e-mail**<br>dardonville@iqm.csic.es |


## DATOS DEL PROYECTO

**Título:** Búsqueda de nuevos fármacos antiparasitarios para enfermedades desatendidas (leishmaniosis, enfermedad de Chagas, enfermedad del sueño)

**Breve descripción de los objetivos, contenido del proyecto y tareas a realizar**

El estudiante llevará a cabo la síntesis de nuevos compuestos antiparasitarios. Los compuestos sintetizados serán enviados a grupos colaboradores para ser probados *in vitro* contra los parásitos responsables de diferentes parasitosis.

Tareas a realizas:
- Síntesis orgánica de los compuestos
- Purificación de los compuestos por cromatografía y recristalización
- Caracterización por métodos espectroscópicos (RMN de $^{1}H$ y $^{13}C$, HPLC–MS)
- Preparación de las muestras para ensayos biológicos
- Manejo de los programas MestRenova (RMN) y Masslynx (Masas)
- Búsqueda bibliográfica en bases de datos de química (SciFinder, Reaxys)

**Capacidades y conocimientos recomendables que debe tener el estudiante para la realización de este proyecto**
- Conocimientos en síntesis orgánica y experiencia en laboratorio de química orgánica.

**Indíquese cualquier otra aclaración que se considere que pueda ayudar a los estudiantes en la elección del TFM**

Las enfermedades parasitarias causadas por protozoos patógenos o por helmintos afectan a más de tres mil millones de seres humanos y a un número muy elevado de animales, lo que supone un elevadísimo coste tanto en salud como económico, especialmente en los países menos desarrollados.
Centrándonos en el caso de afecciones protozoarias en humanos, los tratamientos asequibles actualmente no resultan satisfactorios: compuestos poco efectivos, con efectos secundarios en ocasiones graves, aparición de frecuentes fenómenos de resistencia, etc. Estos medicamentos entran dentro de la clasificación de "medicamentos huérfanos" debido a que la población a la que van dirigidos (países del tercer mundo) no tiene recursos económicos, lo que produce falta de interés para las grandes empresas farmacéuticas.
Nuestro grupo se interesa por la búsqueda de agentes quimioterapéuticos contra parásitos protozoarios del género *Trypanosoma* (*Trypanosoma brucei* y *Trypanosoma cruzi*), *Plasmodium*, *Leishmania*, y *Trichomonas*.

MASTERQO
MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGÁNICA

# PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2021-2022

## DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE


| | |
|---|---|
| **Apellidos y nombre del director(es) del proyecto: González-Muñiz, Rosario** | |
| **Cargo: Investigador científico** | |
| **Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto:**<br><br>**Instituto de Química Médica, CSIC** | |
| **Teléfono directo**<br>**912587434** | **e-mail**<br>iqmg313@iqm.csic.es |


## DATOS DEL PROYECTO

COVID-19: buscando soluciones desde la química médica

**Breve descripción de los objetivos, contenido del proyecto y tareas a realizar**

Dentro de nuestro proyecto COVID-PIE-153, hemos identificado distintas familias de compuestos con actividad antiviral en cultivos celulares infectados con el virus SARS-CoV-2, causante de la pandemia COVID-19. Una de estas familias posee un esqueleto central y cuatro elementos de diversidad (sustituyentes $R^1$-$R^4$). En la actualidad estamos modificando cada uno de estos sustituyentes para intentar optimizar el balance entre la capacidad para frenar la replicación del virus y la citotoxicidad. El trabajo del estudiante de máster consistirá fundamentalmente en la preparación de nuevas entidades químicas dentro de esta familia de compuestos, utilizando metodologías de síntesis orgánica, su purificación mediante técnicas cromatográficas y su caracterización por técnicas espectroscópicas (RMN, MS). Las moléculas preparadas serán evaluadas inicialmente en nuestro Instituto mediante ensayos fluorimétricos con una proteína viral aislada y, posteriormente, los mejores candidatos se evaluarán en células infectadas por SARS-CoV-2 en el Centro Nacional de Biotecnología (CNB-CSIC). Por lo tanto, el estudiante se familiarizará también con los métodos de ensayo y la interpretación de los resultados biológicos.

**Capacidades y conocimientos recomendables que debe tener el estudiante para la realización de este proyecto**

Graduado/licenciado en químicas o farmacia, a ser posible, con experiencia en síntesis orgánica o química farmacéutica.

**Indíquese cualquier otra aclaración que se considere que pueda ayudar a los estudiantes en la elección del TFM**

El alumno recibirá una formación multidisciplinar en química médica y puede contribuir a la investigación básica en un tema de máxima actualidad, el descubrimiento de nuevos agentes antivirales para COVID-19.

Como es un tema ya iniciado y con resultados previos, los compuestos preparados en el TFM se incluirán en una publicación científica futura.

MASTERQO
MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGÁNICA

# PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2021-2022

## DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE


| | |
|---|---|
| **Apellidos y nombre del director(es) del proyecto:**<br>Sánchez Sancho, Francisco // García Csáky, Aurelio | |
| **Cargo:**<br>Científico Titular (CSIC) // Catedrático de Química Orgánica | |
| **Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto:**<br>Instituto de Química Médica (IQM)-CSIC // Depto. Química Orgánica, Facultad CC. Químicas UCM e Instituto Pluridisciplinar UCM | |
| **Teléfono directo**<br>**91 258 74 08** | **e-mail**<br>francisco.sanchez@csic.es // csaky@ucm.es |


## DATOS DEL PROYECTO

| |
|---|
| **Título: Síntesis orgánica de nuevos compuestos con actividad antiinflamatoria** |
| **Breve descripción de los objetivos, contenido del proyecto y tareas a realizar**<br>Síntesis de compuestos con actividad antiinflamatoria, en el marco de las actividades del Grupo de Síntesis Orgánica y Bioevaluación del Instituto Pluridisciplinar UCM, Unidad Asociada de I+D+I al CSIC a través del Instituto de Ciencia y Tecnología de Polímeros (ICTP) y del Instituto de Química Médica (IQM) (https://www.ucm.es/ip-1/osap-index). |
| **Capacidades y conocimientos recomendables que debe tener el estudiante para la realización de este proyecto**<br>Síntesis y reactividad de moléculas orgánicas, caracterización de compuestos orgánicos mediante RMN y MS. |
| **Indíquese cualquier otra aclaración que se considere que pueda ayudar a los estudiantes en la elección del TFM** |

MASTERQO
MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGÁNICA

# PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL 2021-22 (TFM)

## DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE


**Apellidos y nombre del director(es) del proyecto:**

Quesada del Sol, Ernesto

**Cargo:**

Científico Titular OPI

**Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto:**

Instituto de Química Médica.
Agencia Estatal Consejo Superior de Investigaciones Científicas (AE-CSIC).
Departamento de Biomiméticos para el descubrimiento de fármacos.

c/ Juan de la Cierva, 3 E-28006, Madrid (España)

| **Teléfono directo** | **e-mail** |
|---|---|
| 91 562 29 00 (ext. 282 vs 203 vía centralita) | EQ1@iqm.csic.es |


## DATOS DEL PROYECTO

**Título:**

**Inhibidores de enterovirus 71 (EV71): explorando el acceso al bolsillo hidrofóbico de VP1 como diana terapéutica ampliada**.

**Breve descripción de los objetivos, contenido del proyecto y tareas a realizar**

**NOTA PRELIMINAR:**

Debido a las limitaciones de aforo de los laboratorios impuestas por la pandemia COVID19, es necesario que los estudiantes interesados en este proyecto de TFM contacten con el investigador responsable lo antes posible para garantizar la disponibilidad de espacio antes de comprometer con la universidad la asignación del TFM.

**Inhibidores de enterovirus 71 (EV71): explorando el acceso al bolsillo hidrofóbico de VP1 como diana terapéutica ampliada**.

El proyecto propuesto para la realización del Trabajo de Fin de Máster (TFM) estará ubicado dentro de una de las líneas trabajo actualmente en desarrollo en el grupo de investigación del IQM . *Nucleósidos y análogos como fuente de moléculas bioactivas*", grupo que avala una contrastada experiencia formativa, tanto de personal investigador como de personal técnico.

Pese a los indudables avances producidos en el abordaje terapéutico de las enfermedades infecciosas, la aparición de virus emergentes carentes todavía de tratamiento efectivo constituye un problema de salud global de primera magnitud. En consecuencia, el desarrollo de fármacos dirigidos a dianas terapéuticas específicas de patógenos virales reviste un gran interés. Los enterovírus constituyen una família de vírus emergentes, responsables de una serie de enfermedades de creciente incidencia. Entre ellos debe destacarse el enterovirus 71 (EV71), un virus sin envoltura lipídica que contiene ARN de cadena positiva como material genético y pertenece a la familia Picornaviridae. Es el agente causante de la enfermedad de las manos, los pies y la boca (HFMD , por sus siglas en inglés, *Hand Foot and Mouth Disease*). Es una patología leve, pero que en los casos en los que virus accede al sistema nervioso central provoca secuelas neurológicas graves e incluso puede llegar a comprometer la vida del paciente. Debido a su alta capacidad de mutación, a su rápida expansión geográfica y a su potencial pandémico, la infección por EV71 se considera una amenaza emergente para la salud. En el momento actual no hay fármacos aprobados dirigidos contra EV71 (ni contra ningún otro enterovirus), mientras que no se ha logrado todavía el desarrollo de una vacuna de amplio espectro de protección frente a las diferentes cepas. En consecuencia, el desarrollo de nuevas moléculas dirigidas a dianas terapéuticas específicas de EV71 es de gran interés.

EV71 es un virus de pequeño tamaño formado por una cubierta (cápsida) icosaédrica constituida por la organización de cuatro proteínas virales (VP). Las subunidades VP1-VP3 se sitúan expuestas al exterior de la superficie de la cápsida, mientras que VP4 está localizada en su interior. La cápsida es una estructura altamente simétrica en la que se localizan tres ejes de simetría (C2, C3 y C5). Alrededor del eje de simetría C 5 se encuentra una profunda depresión que forma un canal estrecho, conocido como cañón (*canyon*), en el fondo del cual se ubica una bolsa hidrófoba que coincide con el eje de simetría C2. Esta cavidad está ocupada por una sustancia lipofílica (normalmente una esfingosina en EV71), denominada "factor de bolsillo" (*Pocket Factor*, PF). El proceso de *uncoating* del virus requiere la expulsión del PF, lo que conduce a la desestabilización del virión y desencadena la formación de un canal doble ubicado en la base del bolsillo hidrófobo, a través del cual se proyecta el genoma viral dentro de la célula huésped.

El bolsillo hidrófobo se localiza en la subunidad VP1 de la cápsida y se encuentra bastante conservado entre los diferentes serotipos de Rhino y Enterovirus. Mimetizar el PF mediante moléculas sintéticas que pueden insertarse en la cavidad y mantenerse permanentemente dentro ha sido una estrategia utilizada para el desarrollo de agentes antivirales de amplio espectro, conocidos como *Capsid-binders*. Estos compuestos tienen un diseño de forma tubular con una estructura de cabeza-cola, ubicando una cabeza polar en la entrada del poro, mientras que una cola de naturaleza lipofíla queda insertada profundamente dentro de la cavidad.

Sin embargo, la estructura tridimensional de EV71 muestra una serie de características distintivas en comparación con otros Enterovirus. Así, el canal del cañón es menos profundo, mientras que el poro de acceso al bolsillo hidrófobo tiene una mayor área expuesta y una concentración inusual de residuos cargados negativamente. Estas **características diferenciales se pueden explotar para diseñar moléculas mejoradas específicamente dirigidas contra EV71**, extendiendo y modificando el patrón de los grupos funcionales en la cabeza de un agente *Capsid-binder*.

El objetivo del proyecto de TFM se centrará en la síntesis, el aislamiento y la caracterización estructural de una serie de análogos basados en Pirodavir y Vapendavir (ambos potentes *capsid-binders*), elongados en las posiciones de cabeza mediante la introducción covalente de un espaciador que localice en su extremo un grupo amino que se usará como punto focal para posterior funcionalización (incorporando restos polares, hidrofílicos y catiónicos) que conduzcan a interacciones adicionales que aumenten la selectividad y la fortaleza de la unión en la región del poro de EV71. Así mismo, estas modificaciones servirán para mejorar las propiedades farmacocinéticas de los compuestos de referencia. El proyecto será apoyado por estudios de modelado molecular (Prof. Federico Gago, Univ. de Alcalá de Henares) y la evaluación biológica de los nuevos compuestos sintetizados (Prof. Johan Neyts, Instituto Rega, KU Leuven-Bélgica). El proyecto propuesto tiene antecedentes previos y constituye una estrategia novedosa que se explotará en el diseño de inhibidores de entrada mejorados de EV71.

Además de los aspectos conceptuales de la propuesta, al final del proyecto experimental, el estudiante se familiarizará con las técnicas utilizadas en un laboratorio de investigación química focalizado en el proceso de descubrimiento de fármacos. Además, los resultados de la evaluación biológica ayudarán a establecer relaciones de estructura-actividad y a diseñar nuevas moléculas optimizadas de acuerdo a la información obtenida de los ensayos biológicos, en un entorno pluridisciplinar y trasversal.

Entre los objetivos de la realización de un TFM no se persigue únicamente focalizarse en la adquisición de conocimientos técnicos, sino hacer un especial hincapié en el aprendizaje de normas para trabajar con rigor científico, fomentar el pensamiento creativo y crítico, la capacidad de resolución de problemas/toma de decisiones en un contexto de trabajo en grupo como capacidades fundamentales, particularmente en las primeras etapas de contacto con la investigación de los estudiantes.

La Química Médica es una disciplina de naturaleza multidisciplinar, estrechamente relacionada con la investigación química, farmacéutica y biológica, que toma como base troncal la química orgánica. Así, las labores fundamentales del estudiante gravitarán alrededor de la realización de transformaciones químicas, para lo cual será necesario realizar labores de:

- Procedimientos sintéticos (disolución y fase sólida) en diferentes condiciones (atmósferas inertes, altas o bajas temperaturas, presiones, etc.) utilizando un variado conjunto de técnicas y metodologías.

- Manejo de muy diverso material, equipos e instrumentación de laboratorio (material de vidrio científico, bombas, etc.).

- Monitorización de la evolución de las reacciones (TLC y HPLC (UV y/o UV-MS)).

- Elaboración de crudos de reacción (eliminación de volátiles (destilación, rotavapores) y/o extracciones líquido/líquido).

- Purificación de mezclas, normalmente mediante técnicas cromatográficas (diferentes fases estacionarias (convencionales o fase reversa), columnas, CCTLC, equipos automatizados) o mediante recristalizaciones/precipitaciones.

- Caracterización de los productos sintetizados, empleando técnicas analíticas y espectroscópicas (RMN, UV, IR, HPLC).

**Summary of the research proposal**

**Inhibitors of Enterovirus 71 (EV71): exploring the hydrophobic pocket of VP1 as an extended therapeutic target**

In spite of the recent advances made in the development of therapeutics directed against infectious diseases, the rising of emerging viruses lacking of effective treatments is a global health problem. A highly concerning group of significant diseases are caused by Enteroviruses. Among them, enterovirus 71 (EV71) has to be highlighted. This pathogen is a non-enveloped, positive-stranded RNA virus belonging to the Picornaviridae family, genus enterovirus. It is the causative agent of hand, foot and mouth disease (HFMD), a mild syndrome that, if the pathogen reaches the central nervous system, can generate severe neurological sequels, even compromising patient's life. Due to its rapid geographic expansion and pandemic potential, infection by EV71 is considered an emerging threat. At the current moment, there are no approved antiviral drugs directed against EV71 (nor against any other enteroviruses) while wide range vaccine protection still need to be addressed. As a consequence, the development of new molecules directed to specific therapeutic targets of EV71 is of great interest.

EV71 is a small-sized virus formed by an icosahedral capsid shell built by the arrangement of four Viral Proteins (VP). VP1-VP3 subunits are located exposed at the surface, while VP4 is attached inward. The capsid exhibited a highly symmetrical shape and three symmetry axes (C2, C3 and C5) can be observed. Around the 5-fold symmetry axis evolves a deep depression that forms a narrow channel, known as canyon, at the bottom of which there is found a hydrophobic pocket matching the 2-fold symmetry

axis. This cavity is usually fitted by a lipophilic substance (normally, a sphingosine in EV71), described as Pocket Factor (PF). The uncoating of the virus requires the expulsion of the PF, which leads to the destabilization of the virion, triggering the formation of double channel located on the base of the hydrophobic pocket, through which the viral genome is projected inside the host cell.

The hydrophobic pocket is located at the VP1 subunit and it is quite conserved among the different Rhino- and Enterovirus serotypes. Thus, mimicking the PF by synthetic molecules able to be inserted into the cavity and keeping permanently inside has been a strategy used for the development of broad-spectrum antiviral agents, known as *Capsid-binders*. These compounds have a tubular shape design with a head-to-tail structure, locating a polar head at the entrance of the pore while a lipophilic chain is buried deep inside the cavity.

However, the three-dimensional structure of EV71 shows a series of distinctive features compared with other Enteroviruses. Thus, the channel of the canyon is shallower while the hydrophobic pocket pore has a greater exposed area and an unusual concentration of negatively charged residues. These differential features can be exploited to **design improved molecules specifically directed against EV71 extending and modifying the pattern of functional groups at the head of a capsid-binder agent**.

The aim of the project will be focused on the synthesis, isolation and complete structural characterization of a series of analogues based on Pirodavir and Vapendavir (both well-known potent capsid-binders), elongated at the head positions by the introduction of a covalently linked short-length spacer ended with an amino group, which can be used as focal point for further functionalization (incorporating polar, hydrophilic and cationic moieties) leading to additional interactions directed to increase the selectivity and strength of the binding at the pore region of EV71 as well as to improve the pharmacokinetic properties of the reference compounds. The project will be supported by molecular modelling studies (Prof. Federico Gago, Univ. de Alcalá de Henares) and the biological evaluation of the new compounds synthesized (Prof. Johan Neyts, Rega Institute, KU Leuven-Belgium). The proposed project has a previous background and constitutes a novel strategy to be exploited in the design of enhanced entry inhibitors of EV71.

Besides the conceptual aspects of the proposal, at the end of the experimental project the student will have work with the techniques used in a chemical research laboratory focused on the drug discovery process. In addition, the results of the biological evaluation will help to establish structure-activity relationships (SAR) and it will allow proposing the design of novel optimized molecules from the information evolved of the biological tests, in a multidisciplinary and traslational environment.

**Capacidades y conocimientos recomendables que debe tener el estudiante para la realización de este proyecto**

El proyecto se encuadra dentro del área de conocimiento de la **Química Médica** y disciplinas afines (química terapéutica; química orgánica; química biológica). El trabajo, por tanto, estaría particularmente destinado a estudiante de disciplinas científicas (química, farmacia, etc), siendo MUY IMPORTANTE el **conocimiento y experiencia previa** en el área de la **química orgánica sintética**.

The work would be particularly suitable for students with knowledge and previous experience in synthetic organic chemistry (VERY IMPORTANT)

**Indíquese cualquier otra aclaración que se considere que pueda ayudar a los estudiantes en la elección del TFM**

Debido a las limitaciones de aforo de los laboratorios impuestas por la pandemia COVID19, es necesario que los estudiantes interesados en este proyecto de TFM **contacten con el investigador responsable** lo antes posible **para garantizar la disponibilidad de espacio antes de comprometer con la universidad la asignación del TFM**.

El estudiante quedará integrado en la dinámica habitual de trabajo del grupo de investigación del IQM "*Nucleósidos y análogos como fuente de moléculas bioactivas*", que avala una contrastada experiencia formativa, tanto de personal

investigador como de personal técnico. El grupo mantiene activo diferentes proyectos de investigación, en una de cuyas líneas se incorporará el estudiante.

*Instituto de Química Médica CSIC. c/ Juan de la Cierva, 3 E-28006, Madrid.*
*Grupo de investigación "Nucleósidos y análogos como fuente de moléculas bioactivas".*
*Página web: http://www.iqm.csic.es/grupo_nucleosidos/*

The students will join the research group "*Nucleosides and analogues as a source of bioactive molecules*" at the Institute of Medicinal Chemistry CSIC (IQM) where their research will be included in one research lines ongoing

Instituto de Química Médica CSIC (IQM)
Research group "Nucleósidos y análogos como fuente de moléculas bioactivas"
c/ Juan de la Cierva, 3 E-28006, Madrid.
Website: http://www.iqm.csic.es/grupo_nucleosidos/

Fecha:13 de julio de 2020

Firma de los directores del proyecto:

QUESADA DEL SOL ERNESTO - DNI 11824956N

Firmado digitalmente por QUESADA DEL SOL ERNESTO - DNI 11824956N
Nombre de reconocimiento (DN): cn=QUESADA DEL SOL ERNESTO - DNI 11824956N, sn=QUESADA DEL SOL, givenName=ERNESTO, c=ES, o=CONSEJO SUPERIOR DE INVESTIGACIONES CIENTIFICAS, ou=CERTIFICADO ELECTRONICO DE EMPLEADO PUBLICO, serialNumber=IDCES-11824956N
Fecha: 2021.07.13 22:04:01 +02'00'

MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGÁNICA

# PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2021-2022

## DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE

| | |
|---|---|
| **Apellidos y nombre del director(es) del proyecto: PÉREZ PÉREZ. MARÍA JESÚS** | |
| **Cargo: Profesor de investigación de OPIs** | |
| **Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto: Instituto de Química Médica (IQM, CSIC). c/ Juan de la Cierva 3, 28006 Madrid.** | |
| **Teléfono directo: 912587516** | **e-mail: mjperez@iqm.csic.es** |

## DATOS DEL PROYECTO

| |
|---|
| **Título: Antivirales frente al SARS-CoV-2: frenar la infección viral mediante el diseño y síntesis de inhibidores de entrada** |
| **Breve descripción de los objetivos, contenido del proyecto y tareas a realizar:**<br>**CONTEXTO: La pandemia Covid-19 derivada de la infección por el virus SARS-Cov-2 ha puesto en evidencia el escaso arsenal de fármacos disponibles para hacer frente a las infecciones virales. Por tanto, es necesario disponer de nuevos fármacos antivirales dirigidos frente al SARS-CoV-2. La entrada del SARS-CoV-2 a la célula huésped está considerada una diana muy atractiva para actuar en etapas tempranas del ciclo replicativo viral. Además, los inhibidores de entrada constituyen excelentes herramientas para caracterizar la interacción entre las proteínas de la corona del virus (spike proteins) y los receptores celulares.**<br>**CONTENIDO: Nuestro grupo de investigación trabaja en la identificación y optimización de compuestos dirigidos a inhibir la replicación de distintos virus patógenos (HIV, EV71, CHIKV, CVB3, etc…). Una de las estrategias empleadas que nos ha llevado antivirales muy potentes es la inhibición de la entrada del virus en la célula huésped. Esa colección de antivirales la hemos evaluado en un ensayo diseñado para identificar inhibidores selectivos de entrada de SARS-CoV-2. De estos ensayos identificamos una serie de compuestos con marcada actividad antiviral y ausencia de toxicidad.**<br>**TAREAS: El/la candidato/a se familiarizará con la temática del proyecto, participará en el diseño de los nuevos prototipos, y realizará la síntesis, purificación y caracterización estructural de un número reducido de compuestos para su evaluación antiviral. Para el diseño empleará distintas bases de datos. La síntesis la realizará siguiendo una estrategia convergente utilizando procedimientos ya puestos a punto en el grupo de investigación. Para la purificación utilizará distintas técnicas cromatográficas. Para la caracterización estructural, hará uso de técnicas espectroscópicas y espectrométricas.** |
| **Capacidades y conocimientos recomendables que debe tener el estudiante para la realización de este proyecto:**<br>**El estudiante debe tener especial motivación por la Química Médica. También debe tener un buen nivel acreditado de inglés** |
| **Indíquese cualquier otra aclaración que se considere que pueda ayudar a los estudiantes en la elección del TFM:**<br>**En este proyecto participan investigadores de otros centros del CSIC (CIB-MS, I2SYSBIO, IBV) por lo que el/la candidato/a podrá integrarse en un proyecto multidisciplinar que le permita tener una visión de cómo distintas disciplinas se complementan para disponer de nuevos antivirales** |

| Director(es) | Título del Proyecto |
|---|---|
| BASTIDA, AGATHA | *Desarrollo de materiales biocatalíticos avanzados basados en quitosanociclodextrina* |
| CHIARA ROMERO, JOSE LUIS | *Moléculas fluorescentes para aplicaciones biomédicas avanzadas* |
| COLOMER UTRERA, IGNACIO | *HFIP mediated C-C multiple bonds functionalization* |
| COLOMER UTRERA, IGNACIO | *Exploring self-assembly fatty acylated biomolecules* |
| DOMÍNGUEZ ÁLVAREZ, ENRIQUE | *Síntesis y purificación de nuevos compuestos organoselénicos como nuevos agentes antibacterianos y antitumorales* |
| FERNÁNDEZ DE LA PRADILLA, ROBERTO | *Estudio de reactividad de organoboranos por la reacción de Matteson* |
| HERRADÓN GARCÍA, BERNARDO | *Preparación de líquidos iónicos y mezclas eutécticas: aplicaciones en síntesis orgánica y en electroquímica* |
| MARCO CONTELLES, JOSÉ LUIS y M.ª MERCEDES RODRÍGUEZ FERNÁNDEZ | *Nuevas compuestos para la terapia de la enfermedad de Alzheimer* |
| VISO BERONDA, ALMA | *Síntesis enantioselectiva de ciclobutanos y ciclopropanos análogos de QPX7728* |
| GÓMEZ LÓPEZ, ANA MARÍA | *Síntesis de híbridos carbohidrato-bodipy para su aplicación en bioimagen* |
| REVUELTA, JULIA | ***Materiales Poliméricos Inteligentes: una alternativa no tóxica a la quimioterapia en cáncer*** |

MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGÁNICA

# PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2021-2022

## DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE

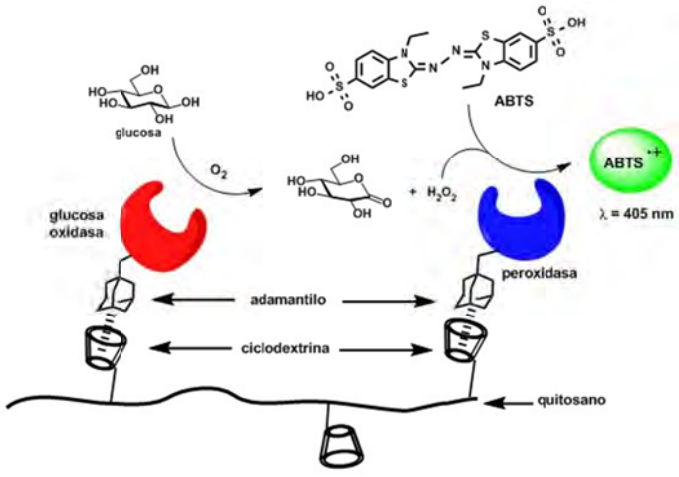

| | |
|---|---|
| **Apellidos y nombre del director(es) del proyecto: Agatha Bastida** | |
| **Cargo: Científico Titular** | |
| **Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto: Instituto de Química Orgánica General, CSIC; Juan de la Cierva, 3, 28006-Madrid** | |
| **Teléfono directo 915618806, ext 921439** | **e-mail Agatha.bastida@csic.es** |


## DATOS DEL PROYECTO

**Título: Desarrollo de materiales biocatalíticos avanzados basados en quitosano-ciclodextrina**

**Breve descripción de los objetivos, contenido del proyecto y tareas a realizar**

Se obtendrán materiales de quitosano funcionalizados con ciclodextrina (CD) con el fin de inmovilizar de modo reversible biocatalizadores. La inmovilización reversible tendrá lugar mediante la formación de un complejo de inclusión en la cavidad de la CD que aloje un grupo adamantilo con alta afinidad por CD, que previamente se ha introducido en el biocatalizador. Se desarrollará un biosensor de glucosa basado en una cascada de dos enzimas que actúan en secuencia: la oxidación de glucosa por la glucosa oxidasa con liberación de peróxido de hidrogeno, el cual es usado por la enzima peroxidasa para transformar ABTS a su forma oxidada (Figura). La inmovilización reversible nos permitirá emplear un mismo soporte de quitosano-CD para distintos sistemas enzimáticos, una vez extraídas las enzimas del sistema anterior




**Capacidades y conocimientos recomendables que debe tener el estudiante para la realización de este proyecto**

Conocimientos de química orgánica y análisis estructural de compuestos orgánicos. Conocimientos de técnicas experimentales básicas en Química Orgánica.

**Indíquese cualquier otra aclaración que se considere que pueda ayudar a los estudiantes en la elección del TFM.** Llevará a cabo un trabajo multidisciplinar, síntesis orgánica, preparación de materiales así como uso de enzimas, su caracterización y estudios cinéticos.

MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGÁNICA

# PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL 2021-22 (TFM)

## DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE


**Apellidos y nombre del director(es) del proyecto:** Viso Beronda, Alma

**Cargo:** Investigadora Científica

**Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto:**

Instituto de Química Orgánica General, Consejo Superior de Investigaciones Científicas, C/ Juan de la Cierva 3, 28006 Madrid

**Teléfono directo:** 91 258 75 15 | **e-mail:** almaviso@iqog.csic.es

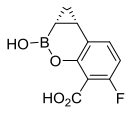

## DATOS DEL PROYECTO

**Título:** Sintesis enantioselectiva de ciclobutanos y ciclopropanos análogos de QPX7728

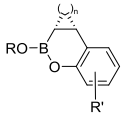
**Breve descripción de los objetivos, contenido del proyecto y tareas a realizar**

La enantiodiscriminación que experimentan los compuestos quirales con valor biológico al enfrentarse con los receptores naturales representa un desafío para las industrias farmacéutica y agroalimentaria, que demandan un suministro eficiente de materiales enantiopuros para el desarrollo de nuevos agentes bioactivos. Esta necesidad estimula el desarrollo de métodos de síntesis asimétrica que permitan construir moléculas quirales de manera esterecontrolada y, dentro de los métodos de síntesis asimétrica accesible, las reacciones de desimetrización de compuestos meso son una estrategia fundamental para obtener moléculas enantiopuras de forma eficaz. Por otra parte las síntesis de moléculas que contienen ciclos pequeños, 3 y 4 eslabones, es un reto atractivo por la reactividad que les proporciona la tensión de anillo y por el interés creciente de la industria farmacéutica en estos ciclos.

Tomando como punto de partida la síntesis enantioselectiva de ciclobutilboronatos por desimetrización de ciclobutenos meso, a través de reacciones de borilación catalizadas por cobre, desarrollada previamente en el grupo de la Prof. M. Tortosa en la UAM[1] y dentro del contexto de su grupo de investigación, en este trabajo se propone explorar las vias de síntesis de análogos del ácido borónico cíclico QPX7728 un potente inhibidor de betalactamasas de espectro ultra amplio y de carbapenasas, descubierto por por *QPEX biopharma* que se encuentra en fase clínica 1.[2] La metodología que se está desarrollando en nuestro grupo de investigación permitiría acceder en una primera aproximación, a una librería de compuestos con diferentes tamaños de ciclo (n= 1, 2) y distinta sustitución en R y R'.




QPX7728




n = 1, 2


[1]Manuel Guisán-Ceinos, Alejandro Parra, Víctor Martín-Heras, Mariola Tortosa. Enantioselective Synthesis of Cyclobutylboronates via a Copper-Catalyzed Desymmetrization Approach. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2016**, *55*, 6969 –6972

[2]Scott J. Hecker,* K. Raja Reddy, Olga Lomovskaya, David C. Griffith, Debora Rubio-Aparicio, Kirk Nelson, Ruslan Tsivkovski, Dongxu Sun, Mojgan Sabet, Ziad Tarazi, Jonathan Parkinson, Maxim Totrov, Serge H. Boyer, Tomasz W. Glinka, Orville A. Pemberton, Yu Chen, and Michael N. Dudley Discovery of Cyclic Boronic Acid QPX7728, an Ultrabroad-Spectrum Inhibitor of Serine and Metallo-β-lactamases *J. Med. Chem*. **2020**, *63*, 7491−7507.


**Capacidades y conocimientos recomendables que debe tener el estudiante para la realización de este proyecto**

Conocimientos Generales de Química Orgánica y Síntesis Orgánica

**Indíquese cualquier otra aclaración que se considere que pueda ayudar a los estudiantes en la elección del TFM**

El plan de formación previsto para el TFM incluye el aprendizaje de técnicas avanzadas en Síntesis Orgánica, tanto de reacción como de purificación, el análisis estructural de compuestos orgánicos mediante sus datos físicos y espectroscópicos (RMN, EM, rayos X), el manejo de aplicaciones informáticas para la interpretación de datos espectroscópicos (Mestre) y para la representación de estructuras (ChemDraw, Chem3D), el uso de bases de datos científicas, la elaboración y presentación de informes de trabajo, y finalmente, la escritura y defensa del Trabajo fin de Máster.

Fecha: 5 de Julio 2021

Firma de la directora del proyecto:

MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGÁNICA

# PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2021-2022

## DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE


| | |
|---|---|
| **Apellidos y nombre del director(es) del proyecto:**<br>DOMÍNGUEZ ÁLVAREZ, ENRIQUE | |
| **Cargo:**<br>CIENTÍFICO TITULAR | |
| **Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto:**<br>DEPARTAMENTO DE SÍNTESIS, ESTRUCTURA Y PROPIEDADES DE COMPUESTOS ORGÁNICOS (SEPCO);<br>INSTITUTO DE QUÍMICA ORGÁNICA GENERAL, CONSEJO SUPERIOR DE INVESTIGACIONES CIENTÍFICAS (IQOG-CSIC)<br>C/ JUAN DE LA CIERVA 3 | |
| **Teléfono directo**<br>912587661 | **e-mail**<br>e.dominguez-alvarez@iqog.csic.es (contacto preferido por mail) |


## DATOS DEL PROYECTO

**Título:** SÍNTESIS Y PURIFICACIÓN DE NUEVOS COMPUESTOS ORGANOSELÉNICOS COMO NUEVOS AGENTES ANTIBACTERIANOS Y ANTITUMORALES

**Breve descripción de los objetivos, contenido del proyecto y tareas a realizar**

**Objetivos:**

El objetivo de esta oferta de TFM es el diseño, síntesis, purificación y caracterización de nuevos derivados que contienen selenio con una pureza adecuada (>95%) para para poder realizar la evaluación biológica de los mismos.

**Proyecto del director:**

El selenio es un oligoelemento crucial para la vida, debido a que, por sus únicas propiedades fisicoquímicas, desempeña un rol clave en procesos de vital importancia tales como la eliminación de radicales libres, la reducción del estrés oxidativo, y la formación de las hormonas tiroideas, entre otros. Por ello, su deficiencia puede causar graves enfermedades. En las últimas décadas se ha ido descubriendo un gran número de selenocompuestos con diferentes aplicaciones biológicas, tales como selenocompuestos moduladores del estrés oxidativo, compuestos selenados quimiopreventivos, derivados organoselénicos citotóxicos con posibles aplicaciones como antitumorales, selenoderivados antibacterianos, etc.

En este contexto, el director del proyecto lleva años trabajando en la síntesis, purificación y caracterización de selenocompuestos como nuevos antitumorales y antibacterianos. Sus publicaciones pueden consultarse en: www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=23488206300

Dicha evaluación biológica se realizará en centros colaboradores del director del proyecto y consistirá por un lado en la determinación de la citotoxicidad de los derivados, y de su actividad antiproliferativa en líneas celulares tumorales, así como en líneas no tumorales para determinar la selectividad de la acción. Por otro lado, se evaluará la capacidad de los derivados para inhibir el crecimiento de bacterias de interés clínico (*Escherichia coli*, *Staphylococcus aureus*), tanto de cepas bacterianas sensibles y resistentes a la acción de antibióticos.

En función de la actividad de los compuestos obtenidos en el cribado inicial de actividad antitumoral y antibacteriana, y si la disponibilidad de tiempo y recursos de los colaboradores lo permite, se podrían llevar a cabo evaluaciones biológicas adicionales de los compuestos organoselénicos que se sinteticen. Estos ensayos podrían ser:

1. Inhibición de las bombas de eflujo. Estas proteínas transportadoras de membrana con frecuencia son responsables de la capacidad de ciertos tumores y de ciertas cepas bacterianas de desarrollar resistencias a la acción de la quimioterapia y de los antibióticos, respectivamente; ya que gracias a ellas las células tumorales / bacterias reconocen los fármacos / antibióticos, y los expulsan fuera de las células. Con la inhibición de estas proteínas se buscaría bloquear esta expulsión, permitiendo que los fármacos de quimioterapia o los antibióticos ejerzan su acción.

2. Ensayos de combinación con fármacos de quimioterapia; para estudiar si al administrar conjuntamente dicho fármaco con el selenoderivado, ambos actúan de forma sinérgica, siendo más potentes que cuando se administran por separado.

3. Ensayos de inhibición de la formación del biofilm bacteriano o de disrupción de dicho biofilm. Uno de los motivos que hacen que las bacterias sean resistentes a los antibióticos es la formación de un biofilm o película que protege a las bacterias adheridas a él. El obtener compuestos que eviten la formación de dicha película, o que la destruyan una vez que se ha formado, es una herramienta poderosa en la lucha contra las cepas resistentes a antibióticos.

**Tareas a realizar:**

El estudiante realizará la síntesis química, la purificación y la caracterización orgánica de estos selenoderivados.

**Técnicas a emplear:**

En la ***síntesis y purificación*** el estudiante manejará las técnicas habituales en un laboratorio de química orgánica, tales como la cromatografía en columna, recristalización, lavado con disolventes, cromatografía en capa fina, etc,

Para la ***caracterización***, aprenderá a utilizar e interpretar técnicas instrumentales de análisis orgánico, tales como:

- Espectrometría de masas.
- Espectroscopía de infrarrojo.
- Espectroscopía de resonancia magnética nuclear (protón, carbono-13, COSY, HMBC, HSQC).
- Microanálisis elemental.
- Puntos de fusión.

**Capacidades y conocimientos recomendables que debe tener el estudiante para la realización de este proyecto**

Química orgánica, química médica, caracterización estructural de compuestos orgánicos (RMN, MS), síntesis orgánica.

**Indíquese cualquier otra aclaración que se considere que pueda ayudar a los estudiantes en la elección del TFM**

El objetivo del proyecto es la síntesis, purificación y caracterización de nuevos compuestos organoselénicos. Los compuestos obtenidos se caracterizarán a través de técnicas instrumentales de análisis orgánico (RMN, MS, IR). La evaluación de la actividad biológica (citotoxicidad, actividad antibacteriana, inhibición de las bombas de eflujo…) la realizarán grupos de colaboradores del tutor en centros colaboradores nacionales e internacionales. Se ofrece la posibilidad de enseñar al estudiante de forma teórica cómo se efectúan dichos experimentos y cómo se interpretan los resultados de los mismos.

MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGÁNICA

# PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL 2021-22 (PROYECTO + TFM)

## DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE


| | |
|---|---|
| **Apellidos y nombre del director(es) del proyecto:** Ignacio Colomer Utrera | |
| **Cargo:** Científico Titular. | |
| **Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto:** Instituto de Química Orgánica General, Consejo Superior de Investigaciones Científicas (IQOG-CSIC). | |
| **Teléfono directo** 915 62 29 00 | **e-mail** colomer@iqog.csic.es |


## DATOS DEL PROYECTO

**Título:** HFIP mediated C-C multiple bonds functionalization.

**Breve descripción de los objetivos, contenido del proyecto y tareas a realizar**

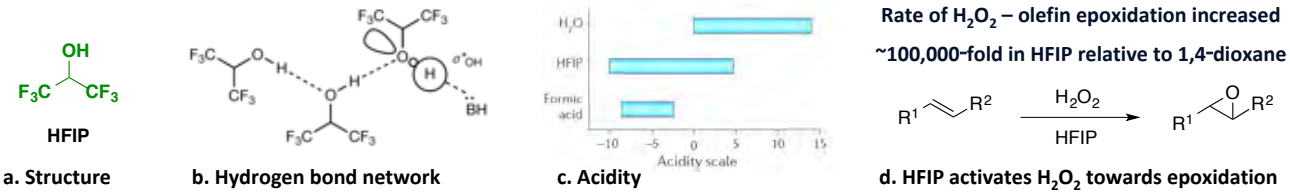
The use of hexafluoroisopropanol (HFIP) as a unique species to promote the functionalization of double and triple bonds.

***Background***

Hexafluoroisopropanol (HFIP, Fig. 1a) has recently become a very popular solvent or additive with applications across the spectrum of chemistry.[1] HFIP possesses a wide range of interesting and unique properties, including:

· Polar solvent with high dielectric constant and ionizing power.
· Relatively low boiling point. · H-bond network (Fig. 1b). · Unusually acidic (Fig. 1c).

These properties make HFIP so unique, with a peculiar reactivity. The ***activation of hydrogen peroxide*** is a classic example, where HFIP has been used in the epoxidation of olefins, displaying ~100,000-fold rate increase relative to 1,4-dioxane (Fig. 1d). [3]




**a. Structure** **b. Hydrogen bond network** **c. Acidity** **d. HFIP activates $H_2O_2$ towards epoxidation**

***Figure 1: Structure, physical and chemical properties of HFIP.***

***Programme***

**C≡C and C=C functionalization** We have recently reported the metal-free Hydroarylation of alkenes using anilines in HFIP (Fig. 2, left), where HFIP both activates de alkene and directs the reactivity towards de *para* position of the aniline. Understanding the mechanism of this transformation allowed us to extend this reactivity to incorporate a valuable $CF_3$ group, without using any further reagent or catalyst in a very atom-economic process (Fig. 2, right).

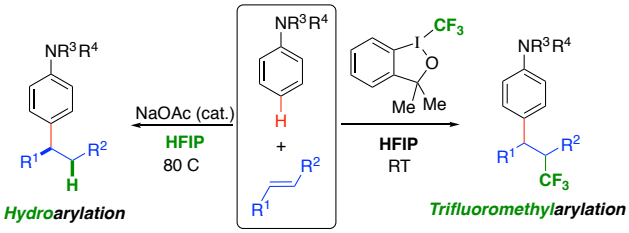



***Figure 2: Hydroarylation and Trifluoromethylarylation of alkenes using anilines***

Herein, we propose to using either Transition metals (Fig. 3, left) or electrochemical conditions (Fig. 3, right) to access valuable building blocks with a higher level of complexity in a selective manner. Starting from conjugated dienes and aromatic compounds we aim to study a chemo-, regio- and enantioselective process. Alternatively, employing electrochemistry we the formation of valuable heterocycles incorporating different Functional Groups will be approached.

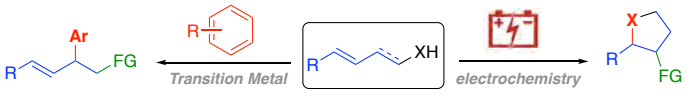



***Figure 3: Proposed Electrochemical and Transition metal catalyzed funcionalizations***

***References***


[1] Colomer, I.; Chamberlain, A.; Haughey, M.; Donohoe, T.J. *Nature Review Chemistry*, **2017**, *1*, 0088.
[2] Colomer, I. *ACS Catalysis*, **2020**, *10*, 6023-6029.
[3] Colomer, I.; Corral, C. *Manuscript submitted*.


**Capacidades y conocimientos recomendables que debe tener el estudiante para la realización de este proyecto**

| Indíquese cualquier otra aclaración que se considere que pueda ayudar a los estudiantes en la elección del TFM |
| --- |

MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGÁNICA

# PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL 2021-22 (TFM)

## DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE


**Apellidos y nombre del director(es) del proyecto:** Ignacio Colomer Utrera

**Cargo:** Científico Titular

**Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto:** Instituto de Química Orgánica General, Consejo Superior de Investigaciones Científicas (IQOG-CSIC).

**Teléfono directo:** 915 62 29 00 | **e-mail:** colomer@iqog.csic.es


## DATOS DEL PROYECTO

**Título:** Exploring self-assembly fatty acylated biomolecules.

**Breve descripción de los objetivos, contenido del proyecto y tareas a realizar**

We propose to study the properties of new amphiphilic fatty acylated biomolecules (dipeptides, carbohydrates, nucleobases).

***Background***

Nature has integrated ***supramolecular self-assembling structures*** where catalysis plays a key role, in connection with replication, encoding information, inheritability and evolution. While **Artificial replication** induced by templates has been now widely studied,[1] an ***alternative*** and ***very attractive strategy*** uses ***self-assembly structures of an amphiphilic product*** (i.e. micelles or vesicles) to catalyse an interfacial reaction to form their own components.[2] This mechanism forms compartments which allow for enclosure of chemical components and reactions. We have recently approached the synthesis of ***amphiphilic small lipopeptides*** to study their supramolecular structures and their autocatalytic behaviour (Fig. 1).[3]

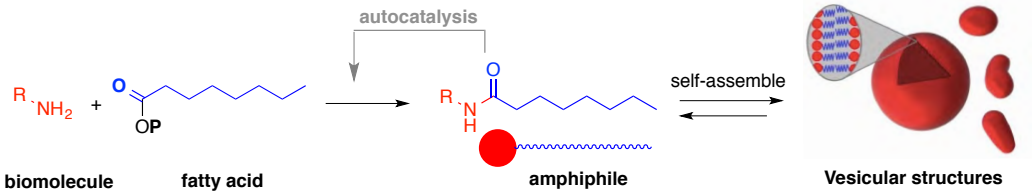



***Figure 1: Self-assembly fatty acylated aminoacids: synthesis and supramolecular properties***

***Programme***

Now, we propose to expand the toolbox of amphiphilic molecules derived from natural-occurring biomolecules, including ***dipeptides*** (Fig. 2a), ***carbohydrates*** (Fig. 2b) and ***nucleobases*** (Fig. 2c).

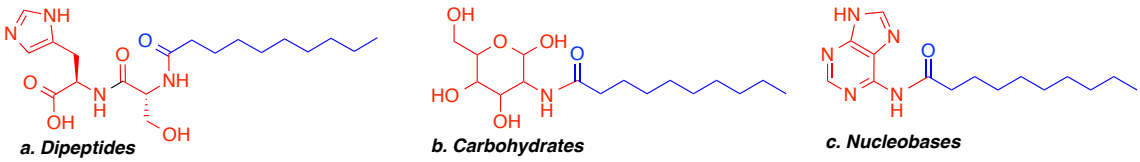



***Figure 2: Proposed amphiphiles to study***

The objectives of this project include:

1. Developing synthetic routes to obtain, isolate and characterize fatty acylated biomolecules.
2. Study the viability of these amphiphilic molecules to aggregate and self-assemble, via CMC determination and using DLS.
3. Explore phase separation conditions to form these amphiphiles, that would allow spontaneous self-assembly
4. Investigate the ability of these supramolecular self-assembly in transition metal catalysis (Fig. 3).[4]

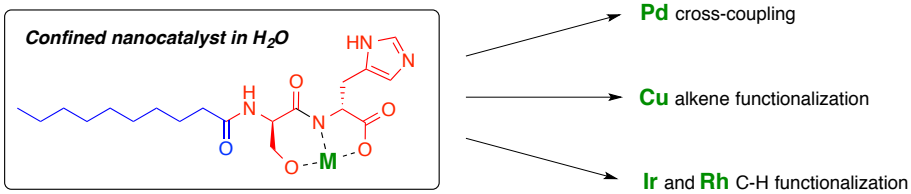



***Figure 3: Lipopeptidic transition-metal complexes as nanocatalysts***

## *References*

[1] Bissette, A. J.; Fletcher, S. P. *Angew. Chem., Int. Ed.* **2013**, *52*, 12800–12826.
[2] Colomer, I.; Morrow, S.; Fletcher, S. P., *Nat. Commun.* **2018,** *9*, 2239.
[3] *Exploring surfactant peptide replication*. César Vicente García. Master thesis. Universidad Autónoma de Madrid. **July 2019**.
[4] (a) Lipshutz, B. H.; Ghorai, S.; Cortes-Clerget, M., *Chemistry – A European Journal* **2018,** 24, 6672-6695. (b) Lipshutz, B. H., *Current Opinion in Green and Sustainable Chemistry* **2018,** *11*, 1-8.

**Capacidades y conocimientos recomendables que debe tener el estudiante para la realización de este proyecto**

Students with a decided interest in synthetic organic chemistry, willing to interact with the field of supramolecular chemistry, catalysis or prebiotic chemistry to approach the challenging problem of the origin of life.

**Indíquese cualquier otra aclaración que se considere que pueda ayudar a los estudiantes en la elección del TFM**

Ideal candidates with previous experience in an organic chemistry laboratory. Desirable experience in NMR, HPLC, DLS, UV-Spect.

MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGÁNICA

# PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2021-2022

## DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE


| | |
|---|---|
| **Apellidos y nombre del director(es) del proyecto:** Chiara Romero, Jose Luis | |
| **Cargo:** Investigador Científico | |
| **Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto:** Departamento de Química Bioorgánica, Instituto de Química Orgánica General, CSIC; c/Juan de la Cierva 3, 28006 Madrid | |
| **Teléfono directo:** 915622900 Ext: 921320 | **e-mail:** jl.chiara@csic.es |


## DATOS DEL PROYECTO

**Título:** Moléculas fluorescentes para aplicaciones biomédicas avanzadas

**Breve descripción de los objetivos, contenido del proyecto y tareas a realizar**

Se llevará a cabo la síntesis de nuevas moléculas fluorescentes con propiedades fotofísicas avanzadas de interés para aplicaciones en biomedicina (bioimagen o terapia). Las propiedades fotofísicas de los nuevos sistemas desarrollados junto con los ensayos biológicos preliminares en microscopía de fluorescencia con células tumorales de origen humano se estudiarán en colaboración con otros grupos de investigación nacionales que participan conjuntamente con nosotros en los proyectos actualmente en vigor en nuestro grupo. El proyecto podría incluir la funcionalización de nanopartículas basadas en biomateriles naturales sostenibles con el objetivo de desarrollar nuevos antimicrobianos multifuncionales.

**Capacidades y conocimientos recomendables que debe tener el estudiante para la realización de este proyecto**

Química orgánica general, fundamentos básicos de elucidación estructural de compuestos orgánicos (RMN) y técnicas básicas de laboratorio de síntesis orgánica.

**Indíquese cualquier otra aclaración que se considere que pueda ayudar a los estudiantes en la elección del TFM**

Se trata fundamentalmente de un trabajo de síntesis orgánica para la preparación de moléculas funcionales con propiedades avanzadas. El estudio de las propiedades fotofísicas y los ensayos biológicos preliminares de las moléculas sintetizadas se llevarán a cabo en colaboración con grupos expertos en estos campos.

MASTERQO
MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGÁNICA

# PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2021-2022

## DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE


| | |
|---|---|
| **Apellidos y nombre del director(es) del proyecto:** José Luis Marco Contelles | |
| **Cargo:** Profesor de Investigación CSIC | |
| **Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto:** Laboratorio de Química Médica (Instituto de Química Orgánica General, CSIC), C/ Juan de la Cierva, 3; 28006-Madrid | |
| **Teléfono directo** 690391554 | **e-mail** iqoc21@iqog.csic.es |

| | |
|---|---|
| **Apellidos y nombre del director(es) del proyecto:** M.ª Mercedes Rodríguez Fernández | |
| **Cargo:** Profesora Contratada Doctora (UAM) | |
| **Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto:** Departamento de Química Orgánica. Despacho C-I-604. Facultad de Ciencias. C/ Francisco Tomás y Valiente 7. Universidad Autónoma de Madrid; 28049 Madrid | |
| **Teléfono directo** 914972770 | **e-mail** mercedes.rodriguez@uam.es |

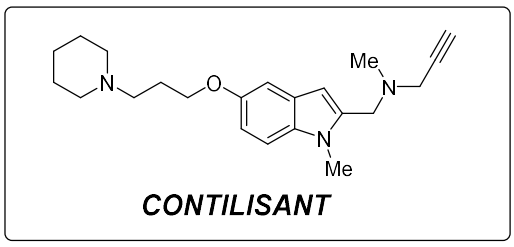

## DATOS DEL PROYECTO

**Título:** Nuevas compuestos para la terapia de la enfermedad de Alzheimer

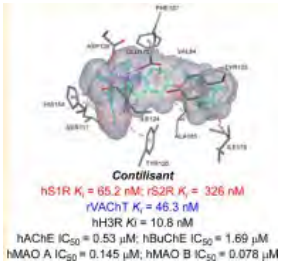
**Breve descripción de los objetivos, contenido del proyecto y tareas a realizar:**

En este proyecto nos hemos propuesto la síntesis y evaluación biológica de nuevos ligandos pequeños para la posible terapia de la enfermedad de Alzheimer, una enfermedad neurodegenerativa, incurable, para la que no hay aún una terapia eficiente, y cuya incidencia en nuestras sociedades avanzadas es cada día mayor, afectando en particular a las personas de la tercera edad.

Para ello se van a diseñar nuevos ligandos en base a los resultados obtenidos por el equipo en los últimos años en relación con "***Contilisant***" (Marco-Contelles, J. et al. *J. Med. Chem*. **2018**, *62*, 6937), el más avanzado y prometedor de los compuestos identificados en nuestro laboratorio para la terapia de la enfermedad de Alzheimer.




CONTILISANT




Las tareas a realizar consistirán en la selección de los compuestos a sintetizar, la puesta a punto de las estrategias y protocolos sintéticos para su obtención, y la evaluación de su potencial neuroprotector *in vitro* frente a insultos tóxicos asociados a la patología.

**Capacidades y conocimientos recomendables que debe tener el estudiante para la realización de este proyecto:**

Química Orgánica, Síntesis Orgánica avanzada, Métodos espectroscópicos.

**Indíquese cualquier otra aclaración que se considere que pueda ayudar a los estudiantes en la elección del TFM**

La parte experimental se llevará a cabo en el laboratorio del IQOG (CSIC)

MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGÁNICA

# PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL 2021-22 (TFM)

## DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE


| | |
|---|---|
| **Apellidos y nombre del director(es) del proyecto:** Fernández de la Pradilla, Roberto | |
| **Cargo:** Profesor de Investigación | |
| **Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto:** Instituto de Química Orgánica General, Consejo Superior de Investigaciones Científicas, C/ Juan de la Cierva 3, 28006 Madrid | |
| **Teléfono directo:** 91 258 75 03 | **e-mail:** rfpradilla@iqog.csic.es |


## DATOS DEL PROYECTO

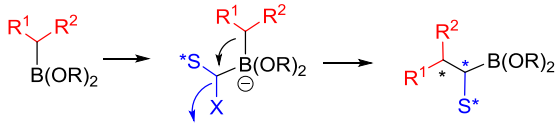
**Título:** Estudio de reactividad de organoboranos por la reacción de Matteson

**Breve descripción de los objetivos, contenido del proyecto y tareas a realizar**

Los compuestos organosulfurados tienen funciones biológicas significativas en nutrición y en medicina, y en particular, los grupos quirales, sulfóxidos, sulfoximinas y sulfinamidas tienen una reactividad muy rica y son herramientas imprescindibles en síntesis asimétrica.[1]

Por otra parte, los organoboranos son compuestos con una reactividad muy interesante que se ha desarrollado con gran intensidad en los últimos años[2]. Gran parte de la reactividad de los organoboranos se debe a que son ácidos de Lewis y, por tanto, son susceptibles de ser atacados por nucleófilos, formando compuestos tetracoordinados, que evolucionan por migración 1,2. La reacción de Matteson se basa en este comportamiento y tiene lugar cuando la migración 1,2 desplaza un grupo saliente, permitiendo la homologación de esteres borónicos en una unidad de carbono.[3]

En esta propuesta se busca explorar la reactividad de los dos heteroátomos, azufre y boro, dentro de un proyecto conjunto con la Prof. Mariola Tortosa, en un nuevo contexto a través de reacciones de tipo Matteson donde un sulfóxido se podría incorporar, como fragmento nucleófilo metalado, sobre un ester borónico para formar un boronato que evolucionaría desplazando un grupo saliente X convenientemente instalado en el fragmento del sulfóxido o del boronato. Los aspectos estereoquímicos de estas nuevas reacciones, así como su generalización se tendrían en cuenta en el desarrollo de este trabajo.





[1] (a) Wojaczyńska, E.; Wojaczyński, J. *Chem. Rev.* **2020**, *120*, 4578-4611. (b) Colomer, I.; Velado, M.; Fernández de la Pradilla, R.; D.; Viso, A. *Chem. Rev*. **2017**, *117*, 14201-14243. [2]Nóvoa, L.; Trulli, L.; Parra, A.; Tortosa, M. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2021**, *60*, 11763–11768. [3]Sandford, C.; Aggarwal, V. K. *Chem.Commun*. **2017**, 53, 5481-5494.


**Capacidades y conocimientos recomendables que debe tener el estudiante para la realización de este proyecto**

Conocimientos Generales de Química Orgánica y Síntesis Orgánica

**Indíquese cualquier otra aclaración que se considere que pueda ayudar a los estudiantes en la elección del TFM**

Se trata de un proyecto para TFM muy formativo incluyendo el aprendizaje de técnicas experimentales avanzadas en Síntesis Orgánica (reacción en distintos medios, purificación por cromatografía, cristalización, etc.), análisis estructural de los compuestos preparados (RMN, espectrometría de masas, rayos X), manejo de aplicaciones informáticas para la interpretación de datos espectroscópicos (Mestre) y para la representación gráfica de estructuras químicas (ChemDraw, Chem3D), uso de bases de datos científicas y de bibliografía, la elaboración y presentación de informes de trabajo, y finalmente, la escritura y defensa

Fecha: 5 de Julio 2021

Firma del director del proyecto:

MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGÁNICA

# PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2021-2022

## DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE


**Apellidos y nombre del director del proyecto:** Herradón García, Bernardo

**Cargo:** Investigador Científico

**Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto:**
Grupo: Péptidos y Compuestos Aromáticos (PEPARO)
Departamento: Síntesis, Estructura y Propiedades de Compuestos Orgánicos (SEPCO)
Centro de investigación: Instituto de Química Orgánica General (IQOG),
Organismo: Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC).
Dirección: c/ Juan de la Cierva 3, 28006 Madrid

| **Teléfono directo:** 699607232 | **e-mail:** b.herradon@csic.es |
|---|---|


## DATOS DEL PROYECTO

**Título:** Preparación de líquidos iónicos y mezclas eutécticas: aplicaciones en síntesis orgánica y en electroquímica.

**Breve descripción de los objetivos, contenido del proyecto y tareas a realizar:**
Los principales objetivos del proyecto son estudiar las aplicaciones de una variedad de **líquidos iónicos** (Lis) y **mezclas eutécticas** (disolvente eutécticos profundos, DEPs) en síntesis orgánica (como catalizadores/promotores y/o disolventes) y como componentes de electrolitos para baterías de ión litio y de ión sodio.
Durante el desarrollo del proyecto se llevará a cabo la síntesis y purificación de diferentes Lis y DEPs.
Este tipo de sustancias se van a caracterizar por una variedad de técnicas químico-físicas, incluyendo las espectroscopias de RMN, IR, Raman, y masas; viscosidad; análisis térmicos (calorimetría y termogravimetría); y electroquímicas (conductividad y voltametría).
En síntesis orgánica realizaremos estudios preliminares del uso de los Lis y los DEPs en metodología sintética que se están desarrollando en nuestro grupo, entre la que podemos mencionar, la síntesis de fosfonatos densamente funcionalizados, derivados de aminoácidos y péptidos, y síntesis de heterociclos aromáticos bicíclicos (índoles, isoquinolinas, quinolinas).
Por otro lado, la investigación en electroquímica servirá para profundizar en los resultados recientemente obtenidos en nuestro grupo de investigación en las aplicaciones de estas sustancias para preparar electrolitos para baterías. Los Lis y los DEPs con mejores propiedades reológicas, térmicas y electroquímicas se usarán como componentes de los materiales para los electrolitos.
Estos materiales se estudiarán electroquímicamente y, posteriormente, se usarán en el ensamblaje de pilas de botón, usando una variedad de óxidos metálicos como cátodos y —en principio— el metal alcalino como ánodo.

**Capacidades y conocimientos recomendables que debe tener el estudiante para la realización de este proyecto:**
Conocimientos en química orgánica, con interés en síntesis orgánica y en las aplicaciones tecnológicas de sustancias orgánicas.

**Indíquese cualquier otra aclaración que se considere que pueda ayudar a los estudiantes en la elección del TFM**:
Este proyecto se enmarca dentro de una investigación en nuestro grupo, que realizamos en colaboración con investigadores del Instituto de Ciencia y Tecnología de Polímeros (ICTP-CSIC) y del Instituto de Ciencia de los Materiales de Madrid (ICMM-CSIC), cuyos objetivos son estudiar nuevos medios (reactivos y disolventes) en química orgánica y en electroquímica.
El estudiante adquirirá experiencia en síntesis orgánica, caracterización estructural de moléculas orgánicas y propiedades químico-físicas de materiales.

MASTERQO
MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGÁNICA

# PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2021-2022

## DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE

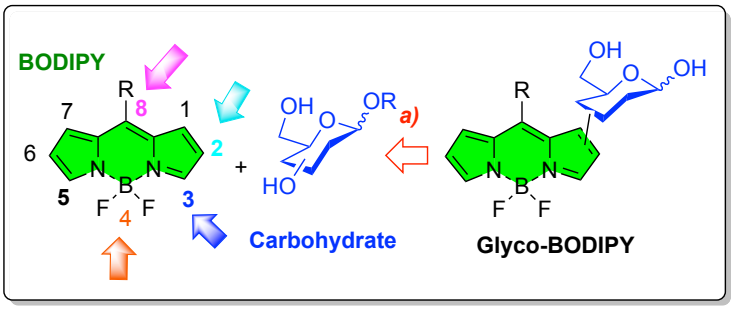

| | |
|---|---|
| **Apellidos y nombre del director(es) del proyecto:**<br>Ana María Gómez López | |
| **Cargo:**<br>Investigador Científico | |
| **Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto:**<br>Departamento de Química Bio-Orgánica, Instituto de Química Orgánica General, CSIC<br>C/Juan de la Cierva 3. 28006. Madrid | |
| **Teléfono directo**<br>912587419 | **e-mail**<br>ana.gomez@csic.es |


## DATOS DEL PROYECTO

**Título: SÍNTESIS DE HIBRIDOS CARBOHIDRATO-BODIPY PARA SU APLICACIÓN EN BIOIMÁGEN**

**Breve descripción de los objetivos, contenido del proyecto y tareas a realizar**

Existe una creciente demanda de materiales fotoactivos, funcionales, y eficaces que faciliten la detección, el análisis y la manipulación de los procesos biológicos, que permitan mejorar tanto el diagnóstico de precisión como las terapias existentes mediante el empleo de la luz. En este contexto, los colorantes orgánicos de tipo borodipirrometenos (BODIPYs),[1] ofrecen un amplio abanico de posibilidades para el desarrollo de materiales con capacidad para recoger energía lumínica y transmitirla a otros sistemas. Dentro de un proyecto general encaminado a la preparación de materiales fluorescentes biocompatibles,[2] en este trabajo se abordarán estrategias sintéticas que permitan la preparación de híbridos carbohidrato-BODIPY.




En este tipo de derivados, la incorporación de los glicanos contribuirá a una mejora en la selectividad del cromóforo hacia dianas biológicas específicas, reducirá la toxicidad y además mejorará la solubilidad en medios acuosos de este tipo de colorantes altamente hidrofóbicos. La metodología de unión se realizará empleando herramientas químicas diferentes dependiendo del punto de unión entre el carbohidrato y el esqueleto de BODIPY (glicosidación, neoglicosidación, CuAAC, Sonogashira). En las estructuras resultantes se evaluará, en colaboración con otros grupos de investigación su internalización en células (grupo de Dra. Mª Rosa Aguilar, ICTP-CSIC) así como sus propiedades fotofísicas (grupo Dr. Jorge Bañuelos, UPV) y láser (grupo Dra. Inmaculada García-Moreno, IQFR-CSIC).


**Referencias**: *1*. a) A. Loudet, K. Burgess, *Chem. Rev*. **2007**, *107*, 4891−4932.

*2*.a) C. Uriel, C. Permingeat, J. Ventura, E. Avellanal-Zaballa, J. Bañuelos, I. García-Moreno, A. M. Gómez, J. C. López, *Chem. Eur. J.* **2020**, *26*, 5388–5399; b) A. M. Gómez, C. Uriel, A. Oliden-Sánchez, J. Bañuelos, I. Garcia-Moreno, J. C. López, *J. Org. Chem.* **2021**, *86*, 9181–9188.


**Capacidades y conocimientos recomendables que debe tener el estudiante para la realización de este proyecto**

El alumno debe tener conocimientos de Química Orgánica General y de Síntesis Orgánica. También sería conveniente el disponer de conocimientos básicos en los aspectos teóricos de las técnicas habituales de caracterización estructural de compuestos orgánicos (RMN, MS, polarimetría, dicroísmo circular).

**Indíquese cualquier otra aclaración que se considere que pueda ayudar a los estudiantes en la elección del TFM**

MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGÁNICA

# PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2021-2022

## DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE


| | |
|---|---|
| **Apellidos y nombre del director(es) del proyecto:** Julia Revuelta | |
| **Cargo:** Científico Titular - CSIC | |
| **Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto:** Departamento de Química Bioorgánica, IQOG, C/Juan de la Cierva, 3, 28006-Madrid | |
| **Teléfono directo** 91 2587582 | **e-mail** julia.revuelta@iqog.csic.es |


## DATOS DEL PROYECTO

**Título:** Materiales Poliméricos Inteligentes: una alternativa no tóxica a la quimioterapia en cáncer

**Breve descripción de los objetivos, contenido del proyecto y tareas a realizar**

La quimioterapia es uno de los tratamientos más utilizados contra el cáncer, junto con la cirugía y la radioterapia. En ella, uno o varios fármacos son administrados al paciente para eliminar o dañar las células cancerosas. Sin embargo, cuenta con varios inconvenientes difíciles de superar, como ciertos efectos secundarios. La toxicidad inherente causa una variedad de síntomas que incluyen debilidad, náuseas y pérdida de cabello, lo que aleja esta terapia de ser la ideal.

En este sentido, en nuestro grupo de investigación estamos tratando de mejorar la eficacia y la especificidad de la quimioterapia utilizando vehículos para administrar los medicamentos solo donde se necesita. De un modo general, se trata de nuevos materiales inteligentes que puedan implantarse en la zona tumoral y que permitan la administración controlada de fármacos en respuesta a un bio-marcador tumoral. Concretamente, en este proyecto, empleamos como bio-marcador la enzima heparanasa, una endoglucosidasa que regula múltiples actividades biológicas relacionadas con el crecimiento tumoral, la angiogénesis y la metástasis

El objetivo concreto del proyecto se basa en el desarrollo de materiales poliméricos inteligentes que incorporen en su superficie moléculas susceptibles de ser hidrolizadas por dicha enzima (sobre-expresada en el tumor) de manera que, una vez insertados en el paciente, permitan la liberación gradual de los fármacos que dichos materiales contienen en su interior.

De entre los diversos materiales a desarrollar en el contexto de este proyecto, está prevista la preparación de hidrogeles de bio-polímeros obtenidos de fuentes naturales. que ha demostrado unas importantes propiedades y funcionalidades, entre las que destacan su biodegradabilidad, biocompatibilidad y ausencia de toxicidad, así como su facilidad de modificación. Además, su empleo se enmarca dentro de los denominados “Objetivos de Desarrollo Sostenible” (ODS), un conjunto de objetivos globales que promueven el crecimiento económico y desarrollo sostenible, en base a los principios de economía circular.

El desarrollo de dichos vehículos inteligentes supondrá una alternativa no tóxica a la quimioterapia mediante el uso de hidrogeles capaces de reconocer y aplicar directamente el fármaco a las células/tejidos tumorales.

En el contexto del proyecto, en una primera etapa se llevará a cabo la modificación química de los polisacáridos seleccionados mediante reacciones regioselectivas y la caracterización químico-física de los derivados obtenidos. Posteriormente, se ensayará la actividad endoglucosidasa de la heparanasa sobre los mismos para, finalmente, llevar a cabo la preparación de los nuevos materiales y su caracterización.

**Capacidades y conocimientos recomendables que debe tener el estudiante para la realización de este proyecto**

Se recomienda que el alumno tenga conocimientos en la manipulación y preparación de macromoléculas, así como en la caracterización químico-física de las mismas.

**Indíquese cualquier otra aclaración que se considere que pueda ayudar a los estudiantes en la elección del TFM**

# PROPUESTAS DE EMPRESAS COLABORADORAS

## CURSO ACADÉMICO 2021–2022

| EMPRESA | TÍTULO / Directores |
|---|---|
| Lilly S.A. | *Evaluación de metodologías metal-free" alternativas a las reacciones de acoplamiento carbono-carbono catalizadas por metales de transición*<br>GARCÍA LOSADA, Pablo |
| Lilly S.A. | *Funcionalización de sustratos orgánicos mediante reacciones fotoquímicas de activación C($sp^3$)–H*<br>GARCÍA LOSADA, Pablo |
| Lilly S.A. | *Desarrollo y aplicación de plataformas de síntesis orgánica en microescala usando mezclas gas-líquido en flujo contínuo*<br>GARCÍA LOSADA, Pablo |
| Synthelia Organics | *Desarrollo, optimización y síntesis de compuestos orgánicos de interés en condiciones de flujo y/o "batch".*<br>TATO MORENO, Francisco & COCA GUSTAVO, Pascual |
| FUNDITEC | *Síntesis de poliuretanos a base de lignina para recubrimientos, adhesivos y elastómeros.*<br>MUÑOZ SUBTIL, Dulce & SAVATÉ GUILERA, Sònia |
| FUNDITEC | *Síntesis de nuevos catalizadores porosos heterogéneos para la conversión de $CO_2$ a carbonatos cíclicos.*<br>MUÑOZ SUBTIL, Dulce & PASCUAL ESCUDERO, Ana |
| FAMAR | *Investigación y desarrollo de formas farmacéuticas con aplicación farmacológica.*<br>SANCLIMENS, Gloria |

MASTERQO
MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGÁNICA

# PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2021-2022

## DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE


| | |
|---|---|
| **Apellidos y nombre del director(es) del proyecto:** Pablo Garcia Losada | |
| **Cargo:** Principal Research Scientist | |
| **Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto:** Centro de Investigación Lilly S.A., Avda. de la Industria 30, Alcobendas, 28108, Spain | |
| **Teléfono directo** +34 91 623 35 99 | **e-mail:** garcia-losada_pablo@lilly.com |


## DATOS DEL PROYECTO

Título: Evaluación de metodologías "metal-free" alternativas a las reacciones de acoplamiento carbono-carbono catalizadas por metales de transición.

**Breve descripción de los objetivos, contenido del proyecto y tareas a realizar**

Los acoplamientos catalizados por metales de transición en la formación de enlaces carbono-carbono son ampliamente utilizados en la industria química por su alta eficiencia y amplia compatibilidad con diversidad de grupos funcionales. Su utilización en la industria farmacéutica ha sido particularmente amplia, a pesar de: a) el impacto de su elevado coste; b)los niveles de metales de transición en los productos farmacéuticos activos están altamente controlados; c) y de requerir habitualmente de procesos tediosos de eliminación del metal que en muchos caso impiden la recuperación del mismo.

Estos factores asociados con la cada día más baja disponibilidad de estos metales, su continuo incremento en coste, asi como factores asociados a la sostenibilidad (Green Chemistry) ha acelerado la búsqueda de alternativas sintéticas como los procesos fotoquímicos[1] o el reemplazo por sistemas catalíticos más sostenibles[2,3].

El trabajo de máster se centrará en la evaluación de metodologías sostenibles de acoplamiento carbono-carbono (ej.: Suzuki-Miyaura) ampliamente usada en programas de desarrollo y búsqueda de fármacos por químico médicos, catalizadas por metales de bajo coste (e.g.: Ni, Cu, etc...) o que no requieran metales de transición (ej: catálisis por aminas o azufre).

El objetivo del proyecto TFM será evaluar el alcance de estas trasformaciones sobre un set de compuestos que permita establecer una operativa para emplear estas estrategias tanto en optimización de condiciones de reacción, como preparación de librerías de compuestos en química médica.


[1] *Organic Photoredox Catalysis.* Nathan A. Romero, David A. Nicewicz. *Chem. Rev.* 2016, 116, 17, 10075–10166

[2] *Sulfur (IV)-Mediated Unsymmetrical Heterocycle Cross-Couplings.* Min Zhou, Jet Tsien, Tian Qin., *Angew. Chem. Int. Ed.* 2020, 59, 7372 –7376

[3] *The amine-catalysed Suzuki–Miyaura-type coupling of aryl halides and arylboronic acids.* Xu, L., Liu, FY., Zhang, Q. *et al.*. *Nature Catal* 4, 71–78 (2021)

**Capacidades y conocimientos recomendables que debe tener el estudiante para la realización de este proyecto**

- Conocimientos básicos de química general, en particular química orgánica y con experiencia/prácticas en laboratorio de química orgánica. Experiencia previa en tareas de diseño, síntesis, purificación y caracterización estructural de compuestos orgánicos.
- Conocimiento básico conceptual de las técnicas de análisis y caracterización de compuestos orgánicos, como por ejemplo: HPLC, GC, y NMR.
- Usuario avanzado de Office (Word, PowerPoint, Excel), programas de dibujo químico y análisis de datos.
- Otras habilidades: proactividad, capacidad de ejecución y trabajo en equipo

**Indíquese cualquier otra aclaración que se considere que pueda ayudar a los estudiantes en la elección del TFM**

Capacidad de trabajar en equipo y entusiasmo por la investigación y la aplicación de la tecnología a la síntesis orgánica.

**Acerca de Lilly: Lilly** une el cuidado con el descubrimiento para crear medicamentos que mejoren la vida de las personas en todo el mundo. Tres valores fundamentales adoptados hace tiempo guían a Lilly en todo lo que hacemos: **Integridad, Excelencia y Respeto por las personas**

**Fecha:** 8 Julio 20221

**Firma del director del proyecto:**

MASTERQO
MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGÁNICA

# PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2021-2022

## DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE


**Apellidos y nombre del director(es) del proyecto:** Pablo Garcia Losada

**Cargo:** Principal Research Scientist

**Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto:**
Centro de Investigación Lilly S.A., Avda. de la Industria 30, Alcobendas, 28108, Spain

| **Teléfono directo** | **e-mail:** |
|---|---|
| +34 91 623 35 99 | garcia-losada_pablo@lilly.com |


## DATOS DEL PROYECTO

**Título:** Funcionalización de sustratos orgánicos mediante reacciones fotoquímicas de activación C(sp3)-H

**Breve descripción de los objetivos, contenido del proyecto y tareas a realizar**

- La funcionalización de moléculas orgánicas, que no requiere el uso de grupo activantes, mediante reacciones de activación de C-H es un campo de gran interés en la síntesis orgánica moderna ya que puede simplificar y reducir los costes y tiempos de preparación de moléculas complejas. En este sentido, la transformaciones por vía fotoquímica juegan un papel muy importante mediante el uso de nuevos catalizadores foto-redox ya que permiten explorar diferentes mecanismos de reacción que dan lugar a transformaciones sintéticas antes no contempladas. De forma más particular, la activación y funcionalización de enlaces fuertes C(sp3)-H mediante reacciones con catalizadores foto-redox está teniendo un gran auge para la exploración de un nuevo espacio químico y tienen un gran recorrido para su estandarización y aplicación en la industria farmacéutica.

*-Los objetivos principales de este Trabajo Fin de Máster son:*

- Uso de los catalizadores tipo "decatungsteno (DT)" para la funcionalización de sustratos orgánicos por vía fotoquímica
- Estudio de las diferentes condiciones de reacción para su posterior aplicación a procesos automatizados: química en paralelo y/o procesos usando química de flujo
- Adquisición de conocimientos básicos y de la tecnología existente en fotoquímica aplicada a síntesis orgánica.

*-Las tareas que realizará el/la estudiante serán:*

- trabajo experimental de laboratorio
- análisis e interpretación de los resultados
- extracción de conclusiones y elaboración de hipótesis para posteriores experimentos

*-Referencias bibliográficas recientes sobre el DT*

DT_references.docx

**Capacidades y conocimientos recomendables que debe tener el estudiante para la realización de este proyecto**

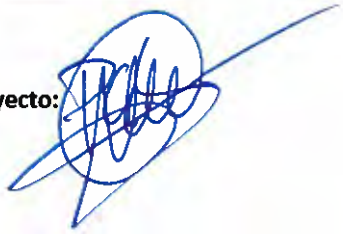
- Conocimientos básicos de química general, en particular química orgánica y con experiencia/prácticas en laboratorio de química orgánica.
- Conocimiento básico conceptual de las técnicas de análisis y caracterización de compuestos orgánicos, como por ejemplo: HPLC, GC, y NMR.
- Usuario avanzado de Office (Word, PowerPoint, Excel), programas de dibujo químico y análisis de datos.
- Otras habilidades: proactividad, capacidad de ejecución y trabajo en equipo

**Indíquese cualquier otra aclaración que se considere que pueda ayudar a los estudiantes en la elección del TFM**
Capacidad de trabajar en equipo y entusiasmo por la investigación y la aplicación de la tecnología a la síntesis orgánica.

**Acerca de Lilly:** Lilly une el cuidado con el descubrimiento para crear medicamentos que mejoren la vida de las personas en todo el mundo. Tres valores fundamentales adoptados hace tiempo guían a Lilly en todo lo que hacemos: **Integridad, Excelencia y Respeto por las personas**

**Fecha:** 8 Julio 20221

**Firma del director del proyecto:**



MASTERQO

MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGÁNICA

# PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2021-2022

## DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE


| | |
|---|---|
| **Apellidos y nombre del director(es) del proyecto:** Pablo Garcia Losada | |
| **Cargo:** Principal Research Scientist | |
| **Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto:** Centro de Investigación Lilly S.A., Avda. de la Industria 30, Alcobendas, 28108, Spain | |
| **Teléfono directo** +34 91 623 35 99 | **e-mail:** garcia-losada_pablo@lilly.com |


## DATOS DEL PROYECTO

Título: Desarrollo y aplicación de plataformas de síntesis orgánica en microescala usando mezclas gas-liquido en flujo continuo

**Breve descripción de los objetivos, contenido del proyecto y tareas a realizar**

- La química de flujo se ha convertido en la última década en una herramienta fundamental dentro de la industria farmacéutica para acelerar el proceso de desarrollo de fármacos. El uso de tecnologías de flujo para la síntesis de compuestos químicos presenta numerosas ventajas, entre las cuales cabe destacar una más eficiente transferencia de materia y energía, que redunda en un mejor control de las variables del proceso, mayor seguridad y mayor selectividad al producto deseado. Además es una tecnología que permite un alto grado de automatización, clave para el screening de condiciones de reacción y la preparación de librerías de compuestos a pequeña escala [1,2] Eli Lilly es una compañía pionera en la implementación de esta tecnología, con más de una década desarrollando procesos de química de flujo en todas las etapas de descubrimiento y desarrollo de medicinas.[3]
- El objetivo del proyecto es el desarrollo y validación de plataformas de química de flujo continuo usando gases como hidrogeno u ozono aplicadas al *screening* de condiciones de reacción y a la preparación de librerías de compuestos en microescala para acelerar la etapa de descubrimiento y desarrollo de nuevos fármacos de los proyectos de química médica.
- Tareas a realizar por el estudiante de Máster:
  - Con ayuda del personal de la empresa (químicos e ingenieros) y a partir de un prototipo inicial se desarrollarán plataformas semi automatizadas de hidrogenación e ozonización.
  - Se validarán dichos equipos usando ejemplos descritos en la bibliografía utilizando materiales de partida comerciales, de forma que los resultados sean reproducibles en el tiempo y demuestren la robustez de las plataformas.
  - Se desarrollarán protocolos para realizar cribados de condiciones de reacción y preparación de librerías de compuestos sencillas, a muy pequeña escala, útiles para la síntesis de futuras moléculas con potencial actividad biológica.

**Capacidades y conocimientos recomendables que debe tener el estudiante para la realización de este proyecto**

- Conocimientos básicos de química general, en particular química orgánica y con experiencia/prácticas en laboratorio de química orgánica. Experiencia previa en tareas de diseño, síntesis, purificación y caracterización estructural de compuestos orgánicos.

---

[1] Plutschack, M. B.; Pieber, B.; Gilmore, K.; Seeberger, P. H. The Hitchhiker's Guide to Flow Chemistry. ***Chem. Rev.*** 2017, **117**, 11796−11893.

[2] Guidi, M.; Seeberger, P. H.; Gilmore, K. How to approach Flow Chemistry. ***Chem. Soc. Rev.***, *2020,**49***, 8910.

[3] Cole et al., ***Science*** 2017, **356**, 1144.

- Conocimiento básico conceptual de las técnicas de análisis y caracterización de compuestos orgánicos, como por ejemplo: HPLC, GC, y NMR.
- Usuario avanzado de Office (Word, PowerPoint, Excel), programas de dibujo químico y análisis de datos.
- Otras habilidades: proactividad, capacidad de ejecución y trabajo en equipo

**Indíquese cualquier otra aclaración que se considere que pueda ayudar a los estudiantes en la elección del TFM**
Capacidad de trabajar en equipo y entusiasmo por la investigación y la aplicación de la tecnología a la síntesis orgánica.
**Acerca de Lilly:** Lilly une el cuidado con el descubrimiento para crear medicamentos que mejoren la vida de las personas en todo el mundo. Tres valores fundamentales adoptados hace tiempo guían a Lilly en todo lo que hacemos: **Integridad, Excelencia y Respeto por las personas**

**Fecha:** 8 Julio 20221

**Firma del director del proyecto:**

# PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2021-2022

## DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE


| | |
|---|---|
| **Apellidos y nombre del director(es) del proyecto:** Tato Moreno Francisco / Pascual Coca Gustavo | |
| **Cargo:** Responsables I+D | |
| **Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto:** Synthelia Organics; C/Faraday 7, 28049, Madrid. | |
| **Teléfono directo** 910274829 | **e-mail** francisco.tato@synthelia.com / gustavo.pascual@synthelia.com |


## DATOS DEL PROYECTO

**Título:** Desarrollo, optimización y síntesis de compuestos orgánicos de interés en condiciones de flujo y/o "batch".

**Breve descripción de los objetivos, contenido del proyecto y tareas a realizar**

El alumno llevará a cabo tareas de síntesis orgánica optimizando e incluso desarrollando nuevas rutas de los productos químicos que Synthelia considere de interés involucrándose completamente en las tareas habituales de la empresa. El planteamiento del trabajo que se llevará a cabo será:

- la solución de problemas de química que se presentan en procesos tradicionales que tienen lugar en la industria químico/farmacéutica.
- la mejora de procesos existentes.
- la expansión de los conocimientos adquiridos del proceso para ver sus limitaciones.

La idea general es que el trabajo realizado pueda ser valorizado bien por la incorporación del proceso estudiado a un proceso productivo de Synthelia o bien por la publicación del resultado en alguna revista científica relevante.

**Capacidades y conocimientos recomendables que debe tener el estudiante para la realización de este proyecto**

· Aptitud para relacionarse con otras personas del equipo.
· Capacidad de trabajo en equipo.
· Habilidad para la comunicación oral y escrita en la exposición de resultados y/o ideas.
· Capacidad de análisis y síntesis.
· Habilidad para utilizar las tecnologías de la información y las comunicaciones más avanzadas.
· Adecuado uso de los equipos de seguridad.
· Hábito o aptitud para la comprensión de lectura científica.
· Habilidad para realizar búsquedas bibliográficas.
· Capacidad para el manejo de equipamiento técnico.

**Indíquese cualquier otra aclaración que se considere que pueda ayudar a los estudiantes en la elección del TFM**

# PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2021-2022

## DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE


| | |
|---|---|
| **Apellidos y nombre del director(es) del proyecto:** | Muñoz Subtil, Dulce<br>Sabaté Guilera, Sònia |
| **Cargo:** Investigadora principal (Dulce Muñoz)<br>Investigadora (Sònia Sabaté) | |
| **Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto:**<br>Departamento de Materiales Avanzados<br>Fundación para el Desarrollo y la Innovación Tecnológica, FUNDITEC<br>c/ Faraday 7, Campus de Cantoblanco, 28049 Madrid | |
| **Teléfono directo**<br>670 583 330 / 638 550 019 | **e-mail**<br>dmunoz@funditec.es / ssabate@funditec.es |


## DATOS DEL PROYECTO

**Título:** Síntesis de poliuretanos a base de lignina para recubrimientos, adhesivos y elastómeros

**Breve descripción de los objetivos, contenido del proyecto y tareas a realizar**

El proyecto tiene como objetivo el desarrollo de poliuretanos a base de lignina para aplicaciones de alto valor añadido. La lignina es el polímero aromático de origen natural más abundante en la tierra y ofrece la posibilidad de reemplazar total o parcialmente los polioles derivados del petróleo utilizados en la síntesis de poliuretanos para mejorar la sostenibilidad de estos productos y reducir la huella medioambiental.

El trabajo de investigación consistirá, en primer lugar, en utilizar la lignina procedente del fraccionamiento de biomasa, así como monómeros y oligómeros obtenidos de su despolimerización, como poliol de base biológica para la obtención de poliuretanos. Se estudiarán diferentes condiciones de reacción y proporción de reactivos teniendo en cuenta el índice de hidroxilo y el peso molecular de la lignina. En segundo lugar, la lignina se modificará químicamente para aumentar su reactividad mediante reacciones de esterificación, epoxidación, carbonatación, etc. Los derivados de lignina obtenidos se utilizarán también para sintetizar poliuretanos. Finalmente, los materiales desarrollados serán caracterizados mediante espectroscopía de infrarrojo (FTIR), resonancia magnética nuclear (RMN), calorimetría diferencial de barrido (DSC) y análisis termogravimétrico (TGA), y se evaluarán sus propiedades mecánicas para su aplicación como elastómeros, recubrimientos y adhesivos.

**Capacidades y conocimientos recomendables que debe tener el estudiante para la realización de este proyecto**

Conocimientos de química orgánica y determinación estructural.
Capacidad de trabajar de manera autónoma en el laboratorio, por lo que es recomendable tener experiencia previa en síntesis orgánica (prácticas, TFG).
Interés por la investigación en el área de polímeros y materiales avanzados.
Nivel de inglés suficiente para leer textos científicos, realizar búsquedas bibliográficas y reportar resultados.
Iniciativa, compromiso, organización y alta capacidad de trabajo.

**Indíquese cualquier otra aclaración que se considere que pueda ayudar a los estudiantes en la elección del TFM**

# PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2021-2022

## DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE


| | |
|---|---|
| **Apellidos y nombre del director(es) del proyecto:** | Muñoz Subtil, Dulce<br>Pascual Escudero, Ana |
| **Cargo:** Investigadora principal (Dulce Muñoz)<br>Investigadora (Ana Pascual) | |
| **Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto:**<br>Departamento de Materiales Avanzados<br>Fundación para el Desarrollo y la Innovación Tecnológica, FUNDITEC<br>c/ Faraday 7, Campus de Cantoblanco, 28049 Madrid | |
| **Teléfono directo**<br>670 583 330 / | **e-mail**<br>dmunoz@funditec.es / apascual@funditec.es |


## DATOS DEL PROYECTO

**Título:** Síntesis de nuevos catalizadores porosos heterogéneos para la conversión de $CO_2$ a carbonatos cíclicos

**Breve descripción de los objetivos, contenido del proyecto y tareas a realizar**

El proyecto tiene como objetivo el desarrollo de nuevos catalizadores porosos heterogéneos para su aplicación en la síntesis de carbonatos cíclicos a partir de CO2, que posteriormente sirvan como monómeros en la síntesis de polímeros sostenibles y de alto valor añadido.

El trabajo de investigación consistirá, en primer lugar, en la síntesis de los catalizadores orgánicos heterogéneos mediante reacciones de acoplamiento entre un di-aldehido y una tri- o tetra-amina aromática y la posterior fijación de un metal dentro de la estructura polimérica. Los nuevos catalizadores desarrollados serán caracterizados para determinar sus propiedades físico-químicas. La estructura química mediante espectroscopía de infrarrojo (FTIR) y resonancia magnética nuclear (RMN) en estado sólido y cristalina mediante difracción de rayos X (XRD). La forma, tamaño y morfología de los catalizadores porosos se evaluará usando SEM, TEM, AFM y DLS. Por otro lado, técnicas como DSC, TGA e ICP-MS se emplearán para confirmar su pureza. El área superficial, distribución y tamaño de poro, se calculará según análisis BET y BJH.
Una vez preparados los catalizadores, su frecuencia será estudiada en la reacción modelo de carbonatación entre el $CO_2$ y epóxidos de pequeño tamaño como: óxido de estireno, epoxi hexano ó el epóxido de limoneno.

**Capacidades y conocimientos recomendables que debe tener el estudiante para la realización de este proyecto**

Conocimientos de química orgánica.
Capacidad de trabajar de manera autónoma en el laboratorio, por lo que es recomendable tener experiencia previa en síntesis orgánica (prácticas, TFG).
Interés por la investigación en el área de síntesis orgánica y materiales avanzados.
Nivel de inglés suficiente para leer textos científicos, realizar búsquedas bibliográficas y reportar resultados.
Iniciativa, compromiso, organización y alta capacidad de trabajo.

**Indíquese cualquier otra aclaración que se considere que pueda ayudar a los estudiantes en la elección del TFM**

MASTERQO
MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGÁNICA

# PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2021-2022

## DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE


| | |
|---|---|
| **Apellidos y nombre del director(es) del proyecto:**<br>Gloria Sanclimens | |
| **Cargo:**<br>Directora de I+D | |
| **Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto:**<br>Unidad de Negocio de I+D, FAMAR HEALTHCARE | |
| **Teléfono directo**<br>649736442 | **e-mail**<br>g.sanclimens@famar-group.com |


## DATOS DEL PROYECTO

| |
|---|
| **Título:**<br><br>Investigación y desarrollo de formas farmacéuticas con aplicación farmacológica |
| **Breve descripción de los objetivos, contenido del proyecto y tareas a realizar**<br>1. Investigación y desarrollo de fórmulas para diversas formas farmacéuticas: gota oftálmica, spray nasal, cápsula, comprimido, inyectable…..<br>2. Desarrollo del proceso de fabricación de dichas fórmulas<br>3. Desarrollo de técnicas de caracterización de formas farmacéuticas<br>4. Puesta a punto de métodos de análisis<br>5. Trabajo en un entorno farmacéutico de acuerdo a las guías regulatorias aplicables |
| **Capacidades y conocimientos recomendables que debe tener el estudiante para la realización de este proyecto**<br>1. Conocimientos químicos básicos<br>2. Algún tiempo de experiencia en laboratorios químicos y/o farmacéuticos para cierta autonomía en trabajo experimental<br>3. Capacidad de aprendizaje<br>4. Adaptación a equipos colaborativos de alto rendimiento |
| **Indíquese cualquier otra aclaración que se considere que pueda ayudar a los estudiantes en la elección del TFM** |

# RELACIÓN DE PROYECTOS OFERTADOS POR LA USC PARA LA ASIGNATURA TRABAJO FIN DE MÁSTER (TFM-QO-XX)

| *Grupo de Investigación* | | | | |
|---|---|---|---|---|
| *Institución/Empresa* | *Código* | *Título del proyecto de TFM ofertado* | *Directo(res) del proyecto* | *Lugar de realización* |
| USC | TFM-QO-1 | Nuevas aplicaciones sintéticas de iminas cíclicas de azúcares: Síntesis de forodesina y aza-C-nucleósidos relacionados. | Juan Carlos Estévez<br>Ramón J. Estévez | CIQUS |

| *Grupo de Investigación* | | | | |
|---|---|---|---|---|
| *Institución/Empresa* | *Código* | *Título del proyecto de TFM ofertado* | *Directo(res) del proyecto* | *Lugar de realización* |
| | TFM-QO-2 | Desimetrización enantioselectiva de compuestos meso a través de reacciones multicomponentes catalizadas por cobre. | Martín Fañanas | CIQUS |

| *Grupo de Investigación* | | | | |
|---|---|---|---|---|
| *Institución/Empresa* | *Código* | *Título del proyecto de TFM ofertado* | *Directo(res) del proyecto* | *Lugar de realización* |
| USC | TFM-QO-3 | Procesos acelerados de síntesis de dendrímeros para aplicaciones en diagnóstico. | Eduardo Fernández | CIQUS |

| *Grupo de Investigación* | | | | |
|---|---|---|---|---|
| *Institución/Empresa* | *Código* | *Título del proyecto de TFM ofertado* | *Directo(res) del proyecto* | *Lugar de realización* |
| USC | TFM-QO-4 | Polímeros Helicoidales como Catalizadores Quirales Dinámicos en Síntesis Asimétrica<br>. | Félix Freire<br>Emilio Quiñoá | CIQUS |

| *Grupo de Investigación* | | | | |
|---|---|---|---|---|
| *Institución/Empresa* | *Código* | *Título del proyecto de TFM ofertado* | *Directo(res) del proyecto* | *Lugar de realización* |
| USC | TFM-QO-5 | Nuevos sensores químicos para el diagnóstico de cepas multirresistentes a los antibióticos. | Concepción González Bello | CIQUS |

| *Grupo de Investigación* | | | | |
|---|---|---|---|---|
| *Institución/Empresa* | *Código* | *Título del proyecto de TFM ofertado* | *Directo(res) del proyecto* | *Lugar de realización* |
| USC | TFM-QO-6 | Nanotubos peptídicos para el tratamiento de células cancerosas | Juan R. Granja | CIQUS |

| Grupo de Investigación | | | | |
|---|---|---|---|---|
| ***Institución/Empresa*** | ***Código*** | ***Título del proyecto de TFM ofertado*** | ***Directo(res) del proyecto*** | ***Lugar de realización*** |
| USC | TFM-QO-7 | Síntesis enantioselectiva de heterociclos mediante activación C-H | Moisés Gulías Costa<br>José Luis Mascareñas | CIQUS |
| | TFM-QO-8 | Síntesis de productos heterocíclicos de interés biomédico mediante ciclaciones enantioselectivas basadas en la activación de enlaces C-H | José Luis Mascareñas<br>Fernando López García | CIQUS |

| Grupo de Investigación | | | | |
|---|---|---|---|---|
| ***Institución/Empresa*** | ***Código*** | ***Título del proyecto de TFM ofertado*** | ***Directo(res) del proyecto*** | ***Lugar de realización*** |
| | TFM-QO-9 | Estudio de la topología peptídica en su interacción con la membrana celular | Javier Montenegro<br>Julián Bergueiro Álvarez | CIQUS |

| Grupo de Investigación | | | | |
|---|---|---|---|---|
| ***Institución/Empresa*** | ***Código*** | ***Título del proyecto de TFM ofertado*** | ***Directo(res) del proyecto*** | ***Lugar de realización*** |
| USC | TFM-QO-10 | Funcionalización post-sintética de nanopartículas de oro | Manuel Paz Castañal<br>Carlos Vázquez Vázquez | F. Química |

| Grupo de Investigación | | | | |
|---|---|---|---|---|
| ***Institución/Empresa*** | ***Código*** | ***Título del proyecto de TFM ofertado*** | ***Directo(res) del proyecto*** | ***Lugar de realización*** |
| | TFM-QO-11 | Hacia la síntesis de nuevos cicloarenos mediante reacciones de cicloadición de arinos | Diego Peña<br>Silvia Castro | CIQUS |
| | TFM-QO-12 | Hacia el antikekuleno: síntesis y reactividad de precursores de arino derivados de [N]fenilenos | Dolores Pérez<br>Diego Peña | CIQUS |

| Grupo de Investigación | | | | |
|---|---|---|---|---|
| ***Institución/Empresa*** | ***Código*** | ***Título del proyecto de TFM ofertado*** | ***Directo(res) del proyecto*** | ***Lugar de realización*** |
| USC | TFM-QO-13 | Emisores de luz polarizada basados en Polidifenilacetilenos funcionalizados con emisores de luz inducida por agregación | Emilio Quiñoá<br>Félix Freire | CIQUS |

| Grupo de Investigación | | | | |
|---|---|---|---|---|
| ***Institución/Empresa*** | ***Código*** | ***Título del proyecto de TFM ofertado*** | ***Directo(res) del proyecto*** | ***Lugar de realización*** |

| | | | | |
|---|---|---|---|---|
| USC | TFM-QO-14 | Activación fotoquímica de aminas promovida por luz visible | Carlos Saá<br>Manuel Nappi | CIQUS |
| | TFM-QO-15 | Nuevas rutas sostenibles a HAPs non bencenoides | Carlos Saá<br>Jesús A. Varela | CIQUS |

| ***Grupo de Investigación*** | | | | |
|---|---|---|---|---|
| ***Institución/Empresa*** | ***Código*** | ***Título del proyecto de TFM ofertado*** | ***Directo(res) del proyecto*** | ***Lugar de realización*** |
| USC | TFM-QO-16 | Interacción de materiales basados en tetrafenilmetano con fullerenos para aplicaciones electroquímicas | Mercedes Torneiro Abuín<br>Massimo Lazzari | F. Química |

| ***Grupo de Investigación*** | | | | |
|---|---|---|---|---|
| ***Institución/Empresa*** | ***Código*** | ***Título del proyecto de TFM ofertado*** | ***Directo(res) del proyecto*** | ***Lugar de realización*** |
| USC | TFM-QO-17 | Identification of β -hairpin catalytic metallopeptides through SPOT combinatorial screening | M. Eugenio Vázquez Sentís<br>Soraya Learte Aymami | CIQUS |

Santiago de Compostela, 13 de septiembre de 2021

El Coordinador del Máster

Fdo.: Ramón J. Estévez Cabanas

MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGÁNICA

# PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2021-2022

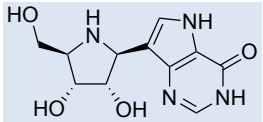
## DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE


| | |
|---|---|
| **Apellidos y nombre del director(es) del proyecto:**<br>Estévez Cabanas Juan Carlos y Estévez Cabanas Ramón J. | |
| **Cargo:** Profesor titular y catedrático | |
| **Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto:**<br>CIQUS | |
| **Teléfono directo**<br>881815730 | **e-mail**<br>juancarlos.estevez@usc.es |


## DATOS DEL PROYECTO

**Título:** Nuevas aplicaciones sintéticas de iminas cíclicas de azúcares: Síntesis de forodesina y aza-C-nucleósidos relacionados

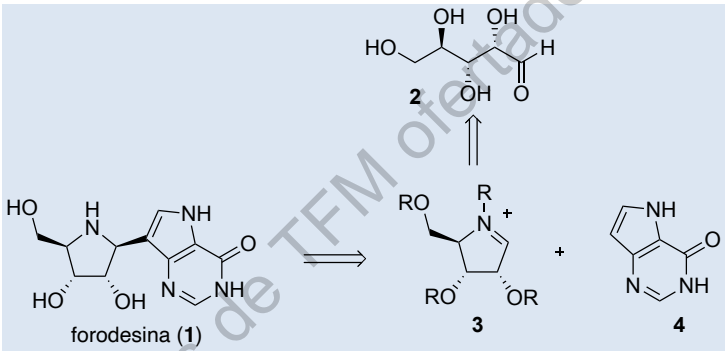
La enzima PNP ha sido ampliamente investigada, debido a su capacidad de catalizar la fosforólisis reversible de ribonucleósidos y 2'-desoxirribonucleósidos de guanina y otros muchos análogos de nucleósidos.



forodesina (**1**)

La relación entre la deficiencia de PNP y ciertos tipos de enfermedades inmunológicas, como el cáncer de células T, la artritis reumatoide, psoriasis y otras enfermedades autoinmunes han hecho que esta enzima se convirtiese en una importante diana terapéutica.

En la pasada década se han identificado varios inhibidores potentes de la PNP, todos los cuales tienen estructura de aza-C-nucleósidos. Uno de ellos, la forodesina está siendo utilizada actualmente como medicamento.



**Esquema 1**

Las síntesis de forodesina descritas hasta el momento permiten obtenerla en pequeñas cantidades y con rendimiento moderados. Por ello, es necesario desarrollar rutas más eficaces, para su obtención a gran escala.

En marco de nuestras investigaciones actuales sobre iminas cíclicas derivadas de azúcares, nos proponemos desarrollar una nueva síntesis total de forodesina que permita lograr este objetivo de obtención eficiente a gran escala. Ello se llevará a cabo de acuerdo con el siguiente planteamiento retrosintético indicado en el Esquema 1:

Esta estrategia sintética será extendida a la preparación de análogos de forodesina, que serán objeto de estudios de evaluación farmacológica.

**Capacidades y conocimientos recomendables que debe tener el estudiante para la realización de este proyecto**

Se considera recomendable haber realizado el TFG en temática de Química Orgánica sintética.

Proyectos de TFM ofertados por la USC: resúmenes explicativos

**PROPUESTA DE PROYECTO DE TRABAJO FIN DE MÁSTER (Curso académico 2021/22)**

## DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE


| | |
|---|---|
| **Apellidos y nombre del director del proyecto:** Fañanás Mastral, Martín | |
| **Cargo:** Profesor Titular | |
| **Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto:** CiQUS, USC, Jenaro de la Fuente s/n, 15782 Santiago de Compostela | |
| **Teléfono directo** (+34) 8818 15787 | **e-mail** martin.fananas@usc.es |


## DATOS DEL PROYECTO

**Título: Desimetrización enantioselectiva de compuestos *meso* a través de reacciones multicomponente catalizadas por cobre**

**Breve descripción de los objetivos, contenido del proyecto y tareas a realizar**

El desarrollo de reacciones asimétricas multicomponente que dan un acceso eficiente a moléculas tridimensionales altamente funcionalizadas capaces de experimentar diferentes transformaciones químicas representan uno de los retos más importantes en la química actual. Además, este tipo de procesos son muy valiosos para acelerar el descubrimiento de nuevos fármacos utilizando el concepto de "Diversity Oriented Synthesis", siendo de alto interés para la industria química y farmacéutica.[1]

En nuestro grupo de investigación se está llevando a cabo el estudio de procesos catalíticos multicomponente que permitan el ensamblaje de moléculas complejas a partir de materiales de partida sencillos. En este contexto, recientemente hemos desarrollado diferentes reacciones de alilboración de alquinos que conducen a la formación selectiva de dienil boronatos.[2-4] En el marco de esta línea de investigación, en este proyecto se pretende el desarrollo de una metodología catalítica asimétrica que permita aplicar esta transformación a la desimetrización enantioselectiva de compuestos *meso* cíclicos. Esta reacción permitirá obtener productos quirales con múltiples centros estereogénicos y con un alto grado de funcionalidad que permitirá su transformación en diferentes arquitecturas moleculares (Figura 1).

**Figura 1**

El/La alumno/a sintetizará diferentes compuestos alílicos *meso*, de diferente tamaño, que servirán como productos de partida para la transformación propuesta. Una vez completada esta tarea, se ensayarán distintos complejos de cobre quirales hasta encontrar un catalizador que permita llevar a cabo la reacción de desimetrización con altos niveles de regio- y enantioselectividad. En este proceso de optimización, también se ensayarán distintas condiciones de reacción (disolvente, temperatura, aditivos, etc.) con el fin de mejorar la eficiencia del proceso.

Proyectos de TFM ofertados por la USC: resúmenes explicativos

MASTERQO
MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGÁNICA

El/La alumno/a se familiarizará con el modo de funcionamiento de un laboratorio de investigación de química orgánica y organometálica, y, además, manejará una gran variedad de técnicas instrumentales tales como la Resonancia Magnética Nuclear, Cromatografía de Gases/Masas y Cromatografía Quiral HPLC y SFC.


[1] W. R. J. D. Galloway, A. Isidro-Llobet, D. R. Spring, *Nat. Commun.* **2010**, *1*, 80.
[2] J. Mateos, E. Rivera-Chao, M. Fañanás-Mastral, *ACS Catal.* **2017**, *7*, 5340–5344.
[3] E. Rivera-Chao, M. Fañanás-Mastral, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2018**, *57*, 9945–9949.
[4] E. Rivera-Chao, M. Mitxelena, J. A. Varela, M. Fañanás-Mastral, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2019**, *58*, 18230-18234.


**Capacidades y conocimientos recomendables que debe tener el estudiante para la realización de este proyecto**

Grado en Química

Conocimientos básicos en síntesis orgánica y catálisis organometálica

**Indíquese cualquier otra aclaración que se considere que pueda ayudar a los estudiantes en la elección del TFM**

Para más información sobre el grupo de investigación ver: https://www.usc.es/ciqus/es/grupos/fm-lab

Proyectos de TFM ofertados por la USC: resúmenes explicativos

**PROPUESTA DE PROYECTO DE TRABAJO FIN DE MÁSTER (Curso académico 2021/22)**

## DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE

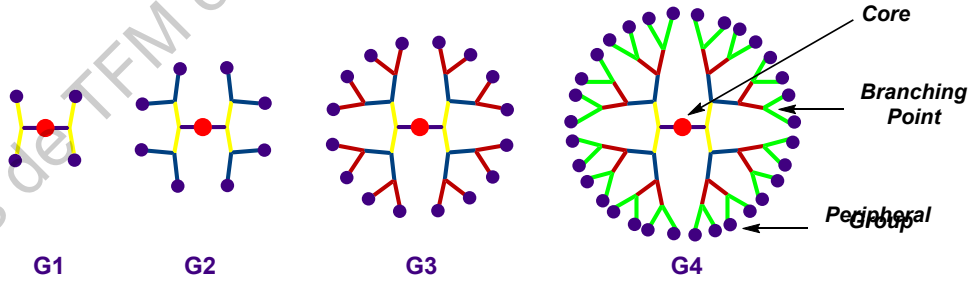

| | |
|---|---|
| **Apellidos y nombre del director del proyecto:** Fernández Megía, Eduardo | |
| **Cargo**: Catedrático de Química Orgánica e Investigador Principal del CIQUS | |
| **Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto:**<br>CIQUS, Universidad de Santiago de Compostela<br>Jenaro de la Fuente s/n, 15782 Santiago de Compostela | |
| **Teléfono directo:** 881 815 727 | **e-mail:** ef.megia@usc.es |


## DATOS DEL PROYECTO

**Título: Procesos Acelerados de Síntesis de Dendrímeros para Aplicaciones en Diagnóstico**

Los dendrímeros son macromoléculas sintéticas ramificadas que se preparan de forma controlada a partir de un núcleo central al que se incorporan unidades de ramificación en diferentes etapas. Las generaciones así obtenidas se caracterizan por tener un tamaño y número de grupos terminales determinado, y unas propiedades físico-químicas y biológicas características. Su naturaleza globular y tamaño nanométrico ha permitido su desarrollo en campos muy diversos. La síntesis de dendrímeros es, sin embargo, un proceso lento que requiere de exhaustivas etapas de purificación.

Con el objetivo de minimizar estas desventajas, nuestro grupo de investigación ha desarrollado recientemente una nueva familia de dendrímeros siguiendo los principios de la química verde: economía atómica, seguridad y reducción de residuos. Para ello, hemos utilizado la cicloadición 3+2 azida-alquino (la más típica dentro de las reacciones click) y aprovechado los triazoles resultantes como punto de ramificación. Los cortos tiempos de reacción y facilidad de purificación permiten la obtención de dendrímeros de elevada generación (hasta 96 grupos terminales) en una sola jornada de trabajo. En este proyecto pretendemos aprovechar esta metodología sintética para la obtención acelerada de dendrímeros funcionalizados en la periferia con grupos cargados y agentes complejantes de metales, para desarrollar aplicaciones en transporte de fármacos y diagnóstico (MRI, SPECT).




**Capacidades y conocimientos recomendables que debe tener el estudiante para la realización de este proyecto**
Iniciativa, organización y trabajo en equipo. Conocimientos de síntesis orgánica y determinación estructural. Experiencia previa de trabajo en laboratorio durante el TFG.

**Indíquese cualquier otra aclaración que se considere que pueda ayudar a los estudiantes en la elección del TFM**

*ACS Nano* **2021**, *15*, 4678 (https://doi.org/10.1021/acsnano.0c09159). *ACS Appl. Mater. Interfaces* **2019**, *11*, 21391 (https://pubs.acs.org/doi/10.1021/acsami.9b05702). *Angew. Chem., Int. Ed.* **2018**, *57*, 5273 (https://doi.org/10.1002/anie.201712244). *J. Am. Chem. Soc.* **2013**, *135*, 11513 (http://dx.doi.org/10.1021/ja4059348). *J. Am. Chem. Soc.* **2013**, *135*, 5966 (http://dx.doi.org/10.1021/ja400951g).

Proyectos de TFM ofertados por la USC: resúmenes explicativos

**PROPUESTA DE PROYECTO DE TRABAJO FIN DE MÁSTER (Curso académico 2021/22)**

## DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE


| | |
|---|---|
| **Apellidos y nombre del director(es) del proyecto:**<br>Freire Iribarne, Félix / Quiñoá Cabana, Emilio | |
| **Cargo:**<br>Profesor Contratado Doctor/ Catedrático | |
| **Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto:**<br>Química Orgánica, Centro de Investigación en Química Biológica y Materiales Moleculares (CiQUS) | |
| **Teléfono directo**<br>**881815729/881815742** | **e-mail**<br>felix.freire@usc.es; Emilio.quinoa@usc.es |

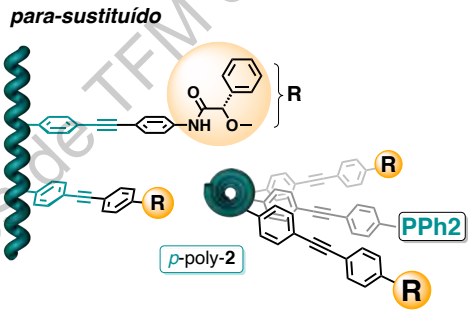

## DATOS DEL PROYECTO

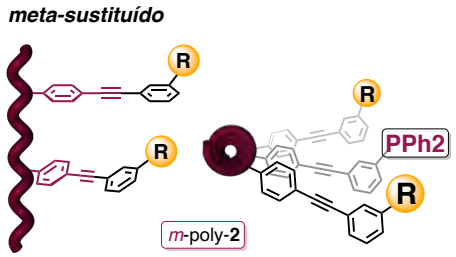
### Polímeros Helicoidales como Catalizadores Quirales Dinámicos en Síntesis Asimétrica

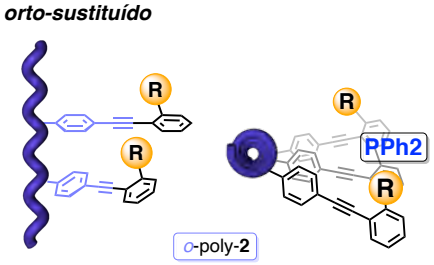
Este Proyecto se enmarca en una línea de trabajo interdisciplinar, relacionada con la Química de Polímeros, la Química Estructural y la Síntesis Asimétrica.

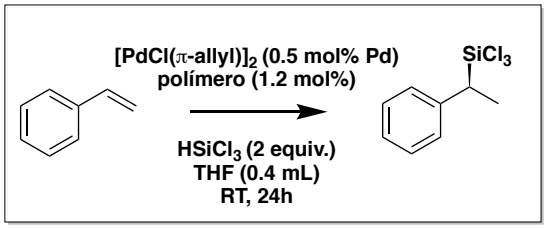
Su objetivo principal es estudiar el papel del polímero helicoidal como catalizador quiral dinámico.

En este caso se prepararán varios derivados de polifenilacetilenos sustituidos en las posiciones orto, meta y para- con el objetivo de cambiar el entorno quiral del centro activo dentro de la hélice y poder así explorar, cómo estos parámetros estructurales afectan a la hora de emplear estos polímeros helicoidales como catalizadores quirales. Además, debido a la posibilidad de cambiar el sentido de giro del polímero mediante estímulos externos hace que podamos cambiar la quiralidad del catalizador y por tanto su efecto en una reacción determinada.




Proyectos de TFM ofertados por la USC: resúmenes explicativos

Referencias del grupo en el campo de los polímeros helicoidales (selección de los últimos 5 años): *1)* ***J. Am. Chem. Soc.*** **2016**, *138*, 9620–9628. 2) ***J. Am. Chem. Soc.*** **2018**, *140*, 667-674. 3) ***Angew. Chem. Int. Ed.*** **2018**, *57,* 3666–367, 4) ***J. Am. Chem. Soc.*** **2018,** *140*, 12239–12246. 15) ***J. Am. Chem. Soc.*** **2019**, 141, 8592-8598.6) ***Chem. Commun., 2019,*** *55, 7906-7909*. 7) ***Angew. Chem. Int. Ed., 2019,*** *58, 13365-13369*. 8) ***Angew. Chem. Int. Ed.,*** **2020,** 59, 4537-4543. 9) ***Nanoscale Horiz.,*** **2020,** *5*, 495-500. 10) ***Angew. Chem. Int. Ed., 2020,*** *59, 9080-9087.* 11) ***Angew. Chem. Int. Ed., 2020,*** *59, 8616-8622*. 12) ***Chemical Science, 2020 ,****11,* 7182-7187.13) ***Angew. Chem. Int. Ed., 2020,*** *59*, 23724-23730. 14) ***Angew. Chem. Int. Ed., 2020****, 60, 8095-8103.* 15) ***Angew. Chem. Int. Ed., 2020,*** *60, 9919-9924.* 16) ***Chem. Mater. 2021*****,** *33*, 4805-4812.

**Webs:**

www.felixfreire.com

https://www.usc.es/ciqus/es/grupos/nanobiomol

**Capacidades y conocimientos recomendables que debe tener el estudiante para la realización de este proyecto**

Grado en Química

**Indíquese cualquier otra aclaración que se considere que pueda ayudar a los estudiantes en la elección del TFM**

El trabajo experimental de este Proyecto se desarrollará en los **laboratorios del Grupo NANOBIOMOL en el CIQUS.**

Proyectos de TFM ofertados por la USC: resúmenes explicativos

MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGÁNICA

**PROPUESTA DE PROYECTO DE TRABAJO FIN DE MÁSTER (Curso académico 2021/22)**

## DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE


| | |
|---|---|
| **Apellidos y nombre del director(es) del proyecto:**<br>GONZÁLEZ BELLO, CONCEPCIÓN | |
| **Cargo:**<br>PROFESORA TITULAR DE UNIVERSIDAD e INVESTIGADORA PRINCIPAL EN EL CIQUS | |
| **Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto:**<br>QUÍMICA ORGÁNICA, USC; CIQUS, calle Jenaro de la Fuente s/n, 15782 Santiago de Compostela | |
| **Teléfono directo**<br>**881 815726** | **e-mail**<br>concepcion.gonzalez.bello@usc.es |


## DATOS DEL PROYECTO

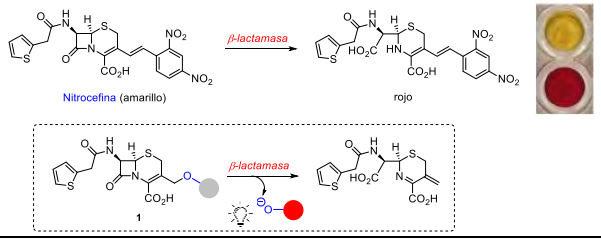
**Título:** *Nuevos Sensores Químicos para el Diagnóstico de Cepas Multirresistentes a los Antibióticos*

**Breve descripción de los objetivos, contenido del proyecto y tareas a realizar**

En los últimos años el impacto de las superbacterias (patógenos multirresistentes) en la salud humana ha impulsado el desarrollo de nuevas estrategias terapéuticas, incluyendo el reposicionamiento de medicamentos aprobados por las agencias reguladoras para el tratamiento de otras enfermedades, así como el desarrollo de métodos de diagnóstico clínico más eficaces. Este proyecto va dirigido al desarrollo de nuevos "SENSORES QUÍMICOS DE SUPERBACTERIAS", para la creación de pruebas de diagnóstico clínico rápidas, efectivas, y económicamente accesibles de cepas multi- y extremadamente resistentes a los antibióticos β-lactámicos, que representan más del 70% de los prescritos actualmente. Con ello se busca: (i) facilitar la elección del tratamiento más apropiado para cada paciente; (ii) analizar la evolución de la resistencia *in vivo*; y (iii) ralentizar la expansión de la resistencia bacteriana, preservando el uso de antibióticos de último recurso, los carbapenems.

La causa más frecuente de resistencia a los antibióticos β-lactámicos en los patógenos Gram-negativos, es la hidrólisis enzimática del anillo β-lactámico catalizada por las β-lactamasas. Hasta la fecha se han identificado ~7000 betalactamasas diferentes, que se clasifican en cuatro grupos (A – D) según su identidad de secuencia. La gran diversidad estructural de este tipo de enzimas, junto con sus diferencias en el mecanismo de acción que utilizan y su distinta capacidad hidrolítica, hace que no exista un método de identificación eficaz para las más peligrosas, las carbapenemasas, como sería deseable. Hoy en día, el compuesto utilizado en los laboratorios clínicos para el diagnóstico de este tipo de cepas es la nitrocefina, una cefalosporina que contiene un grupo dinitrobenceno que le da color amarillo. Si la cepa es resistente, ya que produce una β-lactamasa, la nitrocefina es hidrolizada y proporciona un nuevo compuesto rojo. El que se produzca un cambio de color perceptible visualmente es muy importante, porque evita el uso de instrumentación más sofisticada y es más económico.

En este proyecto se abordará la síntesis del compuesto **1** unido covalentemente a una sonda cromogénica latente, que una vez hidrolizado libere al medio la sonda con la consiguiente aparición de una intensa coloración con lo que se busca mejorar la detección de las β-lactamasas más peligrosas. El alumno deberá identificar el compuesto objetivo mediante las técnicas espectroscópicas convencionales, RMN, IR, rotación óptica, etc., que deberá aprender a manejar, así como a interpretar los espectros obtenidos. La segunda parte del proyecto consistirá en la evaluación microbiológica del compuesto desarrollado con cepas bacterianas resistentes con objeto de validar su utilidad práctica en laboratorios clínicos y que se realizará en colaboración del grupo de microbiología del CHUAC (A Coruña). Estas investigaciones forman parte de uno de los objetivos del proyecto PID2019-105512RB-I00 financiado por el MINECO dentro del Programa de Retos para la Sociedad, dentro del apartado de salud.




**Capacidades y conocimientos recomendables que debe tener el estudiante para la realización de este proyecto**

Conocimientos básicos de síntesis orgánica, así como las técnicas habituales para la identificación de los compuestos.

**Indíquese cualquier otra aclaración que se considere que pueda ayudar a los estudiantes en la elección del TFM**

Este proyecto va dirigido a alumnos interesados en especializarse en química biológica y química médica, en particular en el diseño y desarrollo de compuestos con potencial actividad biológica frente a una diana terapéutica seleccionada, así como en el conocimiento a nivel atómico del mecanismo de acción de dichas dianas como base racional del diseño y la evaluación biológica de los mismos.

PROYECTOS de TFM ofertados 2021 en la USC: resúmenes explicativos

TFM-QO-6

**PROPUESTA DE PROYECTO DE TRABAJO FIN DE MÁSTER (Curso académico 2021/22)**

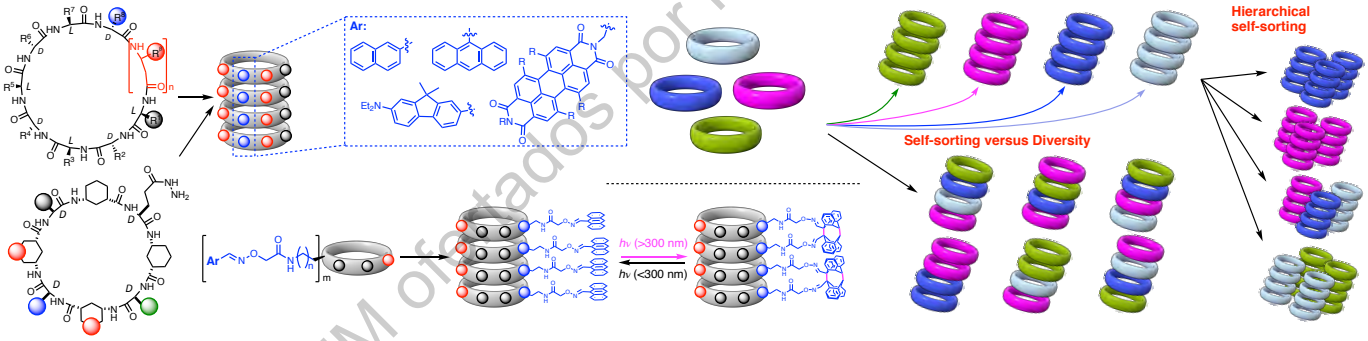
## DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE


| | |
|---|---|
| **Apellidos y nombre del director(es) del proyecto:**<br>Juan R. Granja Guillán | |
| **Cargo:**<br>Catedrático de Universidad | |
| **Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto:**<br>Química Orgánica, CiQUS | |
| **Teléfono directo**<br>**15746** | **e-mail**<br>juanr.granja@usc.es |


## DATOS DEL PROYECTO

**Título: Nanotubos peptídicos para el tratamiento de células cancerosas**

**Breve descripción de los objetivos, contenido del proyecto y tareas a realizar**




Los nanotubos ciclopeptídicos son estructuras poliméricas supramoleculares que se forman por el apilamiento ordenado (auto-ensamblaje) de péptidos cíclicos que adoptan una conformación plana.[1] Para poder alcanzar esta disposición estos péptidos están formados por un número par de aminoácidos de quiralidad opuesta. Estos nanotubos se han utilizado en diversas aplicaciones en él que el control de las propiedades de su cavidad interna, su diámetro y la modulación de su superficie externa son aspectos determinantes.[2] En los últimos años, nuestro grupo ha desarrollado una estrategia sintética en la que se utilizan enlaces covalentes dinámicos (oximas, hidrazonas, etc) para la incorporación de diversos grupos aromáticos.[3] Estos arilos facilitan el apilamiento de los péptidos gracias al efecto hidrofóbico y al establecimiento de interacciones aromáticas ( apilamientos π-π) entre dichos grupos. Gracias a ello se han desarrollados geles, fibras o tubos acodados. La formación de este tipo de estructuras se debe a un proceso de auto-ensamblaje jerarquizado, que empieza por la formación de los nanotubos peptídicos y continua por la agrupación de estos nanotubos formando las correspondientes fibras y finalmente las interacciones de estas con el disolvente da lugar a la formación de geles. En todos ellos los grupos aromático juegan un papel determinante facilitando la formación de los nanotubos y estableciendo interacciones (interdigitación) entre los nanotubos.

En los últimos años los sistemas químicos, cuyas propiedades resultantes viene determinado no por un único componente si no por una mezcla en el que surgen propiedades que no poseen los componentes de forma

Proyectos de TFM ofertados por la USC: resúmenes explicativos

individual, ha emergido con una nueva herramienta para la preparación de nuevos materiales.[4] De esta forma han aparecido procesos químicos novedosos como la autoselección (self-sorting), la simbiosis, la parasitosis, etc.[5]

En este proyecto pretendemos estudiar las bases de estos procesos jerárquicos mediante la construcción de péptidos cíclicos con diferentes sustituyentes aromáticos fluorescentes que nos permitan diferenciar los distintos grados de agregación mediante sus propiedades espectroscópicas (UV-Vis, fluorescencia, dicroísmo circular, etc.). Esperamos que las propiedades estructurales derivadas del péptido y del componente aromático permitan desarrollar un proceso de autoselección que diferencie a los nanotubos que poseen diferentes propiedades. Para ello se pondrá a punto un método sintético que permita la preparación eficiente del péptido cíclico que contenga un grupo hidracida unido a la cadena lateral de un glutámico. Este método debe permitir no solo sintetizar, sino también poder llevar a cabo la ciclación con anterioridad a su separación del soporte sólido sobre el que se ha sintetizado. Este grupo hidracida permitirá la conjugación con diferentes aldehídos aromáticos, tal como se muestra en la figura, para generar un grupo de péptidos diferentes. El estudio de cada uno de estos péptidos por separado o en mezclas entre ellos nos permitirá evaluar las propiedades de autoselección de estos componentes.

Por tanto, en este proyecto el alumno se familiarizará con las técnicas empleadas en la preparación de péptidos cíclicos (fase sólida), con los métodos de síntesis en disolución para la preparación de algún componente básico (aminoácido, post-modificaciones del péptido, etc), con los métodos de purificación y análisis empleados en los laboratorios de química, con los métodos de caracterización de los péptidos (RMN, Ms, etc) y la determinación de sus propiedades supramoleculares (CD, UV-Vis, fluorescencia, STEM, etc.).

1 (a) N. Rodríguez-Vázquez, M. Amorín, J. R. Granja, *Org. Biomol. Chem*. **2017**, 15, 4490-4505. (b) R Q. Song, Z. Cheng, M. Kariuki, S. C. L. Hall, S. K. Hill, J. Y. Rho and S. Perrier, *Chem. Rev.* **2021**, *121*, doi:10.1021/acs.chemrev.0c01291.

2 (a) N. Rodríguez-Vázquez, M. Amorín, I. Alfonso, J. R. Granja, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2016**, *55*, 4504-4508. (b) A. Pizzi, H. L. Ozores, M. Calvelo, R. García-Fandiño, M. Amorín, J. R. Granja, et al., *Angew. Chem. Int. Ed.* **2019**, *58*, 14472-14476. (c) M. Calvelo, C. I. Lynch, J. R. Granja, M. S. P. Sansom, R. García-Fandiño, *ACS Nano.* **2021**, *15*, 7053-7064. (d) A. Lamas, A. Guerra, M. Amorin, J. R. Granja, *Chem. Sci.*, **2018**, *9*, 8228-8233. (e) A. Fuertes, M. Amorín, J. R. Granja, *Chem. Commun.* **2020**, *56*, 46-49.

3 (a) A. Méndez-Ardoy, A. Bayón-Fernández, Z. Yu, C. Abell, J. R. Granja, J. Montenegro, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2020**, *59*, 6902-6908. (b) A. Méndez-Ardoy, J. R. Granja, J. Montenegro, *Nanoscale Horizons* **2018**, *3*, 391-396. (c) F. Novelli, M. Vilela, A. Pazó, M. Amorín, J. R. Granja, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2021**, *60*, 18838-18844.

4 G. Ashkenasy, T. M. Hermans, S. Otto, A. F. Taylor, *Chem. Soc. Rev.* **2017**, *46*, 2543–2554.

5 (a) M. C. LeMieux, M. Roberts, S. Barman, Y. W. Jin, J. M. Kim, Z. Bao, *Science* **2008**, *321*, 101–104. (b) Y. Wang, M. Lovrak, Q. Liu, C. Maity, V. A. A. le Sage, X. Guo, R.Eelkema, J. H. van Esch, *J. Am. Chem. Soc.* **2018**, *141*, 2847–2851.

**Capacidades y conocimientos recomendables que debe tener el estudiante para la realización de este proyecto**

Debe poseer alguna formación en química orgánica, elucidación estructural, especialmente en RMN, y destreza para llevar a cabo transformaciones químicas.

**Indíquese cualquier otra aclaración que se considere que pueda ayudar a los estudiantes en la elección del TFM**

Proyectos de TFM ofertados por la USC: resúmenes explicativos

**PROPUESTA DE PROYECTO DE TRABAJO FIN DE MÁSTER (Curso académico 2021/22)**

## DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE


| | |
|---|---|
| **Apellidos y nombre del director(es) del proyecto: GULÍAS COSTA, MOISÉS; MASCAREÑAS CID, JOSÉ LUIS** | |
| **Cargo: Profesor Contratado Doctor (Moisés Gulías Costa) y Catedrático (José Luis Mascareñas Cid)** | |
| **Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto:** Departamento de Química Orgánica, Universidade de Santiago de Compostela. Edificio Ciqus, c/ Jenaro de la Fuente s/n, 15782, Santiago de Compostela | |
| **Teléfono directo** 88115790 | **e-mail** moises.gulias@usc.es joseluis.mascarenas@usc.es |


## DATOS DEL PROYECTO

**Título:** SINTESIS ENANTIOSELECTIVA DE HETEROCICLOS MEDIANTE ACTIVACIÓN C-H

Nuestro grupo ha hecho aportaciones pioneras en algunos procesos de modificación de enlaces C-H de alquenos usando catalizadores metálicos de rodio, paladio o iridio, para dar lugar a carbociclos y heterociclos de gran interés sintético.[1,2] En los últimos años también hemos desarrollado metodologías para llevar a cabo estos proceso de activación de enlaces C-H de manera enantioselectiva.

En este trabajo fin de máster el objetivo es desarrollar nuevas reacciones enantioselectivas de funcionalización de enlaces C-H. En particular se buscará desarrollar pocesos que conlleven reacciones de activación de cadenas alquílicas y la creación centros quirales en posición β al grupo director. Para ellos se utilizarán complejos de paladio y aminoácidos como ligandos quirales.

El alumno realizará la síntesis de los sustratos y en el diseño y síntesis de los catalizadores. Llevará a cabo reacciones de catálisis metálica con diversos complejos de paladio (II) con ligandos quirales. Purificará e identificará productos. Las reacciones se seguirán mediante técnicas de TLC y Gases-Masas. Las medidas de enantioselectividades se harán en el HPLC quiral y los compuestos obtenidos se caracterizarán mediante técnicas de RMN y Masas.


1. Por una visión genérica de estas reacciones, ver: (a) M. Gulías, José L. Mascareñas, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2016,** *55,* 11000-11019.
2. Para ejemplos de publicaciones recientes del grupo. (a) N. Casanova, A. Seoane, J. L. Mascareñas, M. Gulías. Angew. *Chem. Int. Ed*., **2015**, *54*, 2374. (b A. Seoane, N. Casanova, N. Quiñones, J. L. Mascareñas, M. Gulías, J. *Am. Chem. Soc.* **2014**, 136, 834. c) A. Seoane, N. Casanova, N. Quiñones, J. L. Mascareñas, M.; Gulías, *J. Am. Chem. Soc.* **2014**, 136, 7607.. (d) A. Seoane, C. Comanescu, N. Casanova, R. García-Fandiño, X. Diz, J. L. Mascareñas, M. Gulías *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2019**, *58*, 1700-1704. (e) M. Font, B. Cendón, A. Seoane, J. L. Mascareñas, M. Gulías *Angew. Chem. Int. Ed*., **2018**, 57, 8255-8259. (f) X. Vidal, J. L. Mascareñas, M. Gulías *J. Am. Chem. Soc.*, **2019**, *141*, 1862–1866


**Capacidades y conocimientos recomendables que debe tener el estudiante para la realización de este proyecto**

Formación en Síntesis Orgánica
Conocimiento en técnicas de separación cromatográfica

**Indíquese cualquier otra aclaración que se considere que pueda ayudar a los estudiantes en la elección del TFM**

Proyectos TFM ofertados por la USC: resúmenes explicativos

TFM-QO-8

**PROPUESTA DE PROYECTO DE TRABAJO FIN DE MÁSTER (Curso académico 2021/22)**

## DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE


| | |
|---|---|
| **Apellidos y nombre del director(es) del proyecto:** FERNANDO LÓPEZ GARCIA / JOSÉ LUIS MASCAREÑAS CID | |
| **Cargo:** Investigador Científico CSIC en l CiQUS (FLG) / catedrático de Química Orgánica (JLM) | |
| **Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto:** CIQUS, C/ JENARO DE LA FUENTE, S/N CAMPUS VIDA, SANTIAGO DE COMPOSTELA | |
| **Teléfono directo** **881815781 / 881815737** | **e-mail** fernando.lopez.garcia@usc.es / joseluis.mascarenas@usc.es |

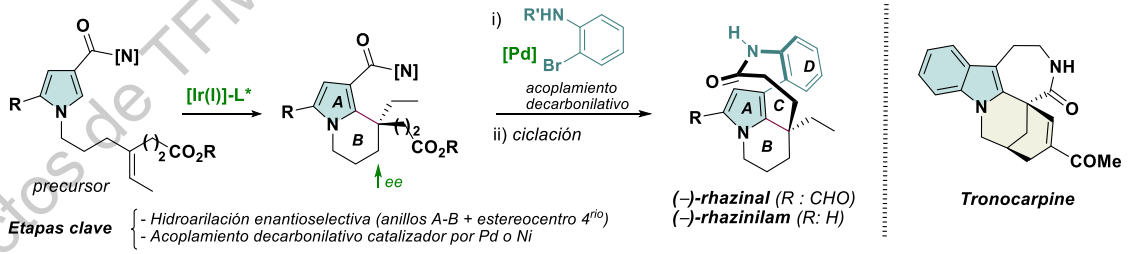

## DATOS DEL PROYECTO

**Título:** Síntesis de productos heterocíclicos de interés biomédico mediante ciclaciones enantioselectivas basadas en la activación de enlaces C–H

**Breve descripción de los objetivos, contenido del proyecto y tareas a realizar**

Recientemente, hemos descubierto procesos enantioselectivos de C-H activación/ciclación intramolecular catalizada por complejos de iridio que permite la formación de estructuras cíclicas que contienen esqueleto central de alcaloides indolínicos, con estereocentros de carbono cuaternarios.[1] En base a estos resultados se plantea la extensión de esta metodología para la síntesis de productos que tengan una estructura central indolínica y posean actividades biológicas relevantes, fundamentalmente antitumorales.

Por una parte, intentaremos aplicar este método a la síntesis de antitumorales como el Rhazinilam un alcaloide tetrahidroindolizínico que interfiere con la polimerización de la tubulina, imitando el mecanismo del taxol. La estrategia involucraría la síntesis del precursor de ciclación (3-4 etapas) y la C-H activación/ciclación enantioselectiva catalizada por iridio. Posteriormente, se optimizaría un acoplamiento cruzado decarbonilativo y, tras breves ,anipulaciones de grupos funcionales se accedería al producto deseado. Paralelamente, exploraremos la viabilidad de de procesos relacionados de C-H activación/ ciclación que proporcionarían directamente el núcleo de tronocarpina (alcaloide en estudio para cáncer de piel).




Referencias


1. A. Arribas, M. Calvelo, D. F. Fernandez, C. A. B. Rodrigues, J. L. Mascarenas, F. Lopez, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2021**. DOI: 10.1002/anie.202105776. Early View.


**Capacidades y conocimientos recomendables que debe tener el estudiante para la realización de este proyecto**

Tener conocimientos en síntesis orgánica y haber desarrollado previamente un TFG relacionado con la síntesis orgánica

**Indíquese cualquier otra aclaración que se considere que pueda ayudar a los estudiantes en la elección del TFM**

Mas info en Metbiocat.eu


Proyectos de TFM ofertados por la USC: resúmenes explicativos

**PROPUESTA DE PROYECTO DE TRABAJO FIN DE MÁSTER (Curso académico 2021/22)**

## DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE

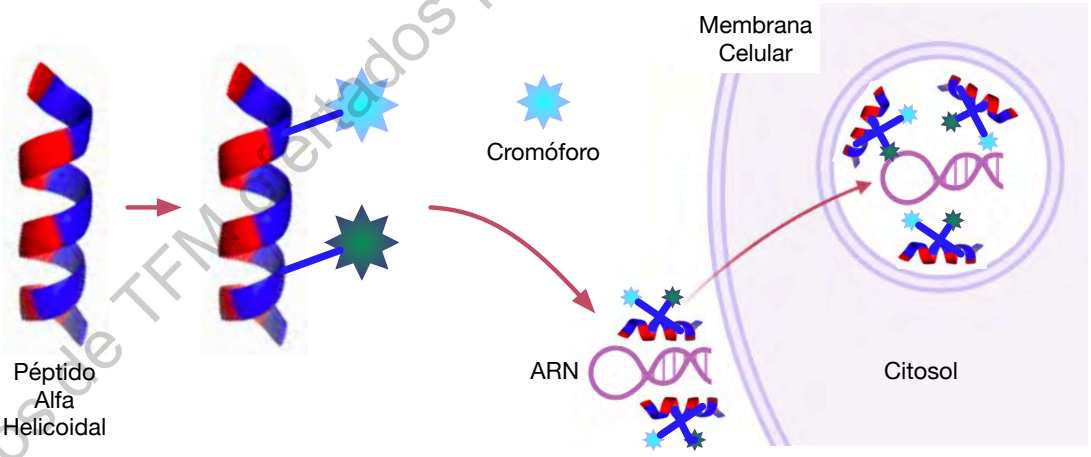

| | |
|---|---|
| **Apellidos y nombre del director(es) del proyecto:**<br>Javier Montengro y Julián Bergueiro | |
| **Cargo:**<br>JM (Prof. Titular, Oportunius Prof.); JB (Juan de la Cierva Incorporación) | |
| **Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto:**<br>CiQUS | |
| **Teléfono directo**<br>981815791 | **e-mail**<br>javier.montenegro@usc.es |


## DATOS DEL PROYECTO

**Título:** Estudio de la topología peptídica en su interacción con la membrana celular

**Breve descripción de los objetivos, contenido del proyecto y tareas a realizar**

Los péptidos sintéticos han demostrado en las últimas décadas ser excelentes transportadores capaces de entregar cargos de interés en el interior celular. El principal objetivo de este proyecto es la interpretación de la topología de las estructuras secundarias peptídicas y mas en concreto la hélice alfa en la interacción con la membrana celular.[1]




Para ello se hará uso de péptidos con tendencia a presentar estructura de hélice alfa con modificaciones con cromóforos en posiciones concretas.[2,3] Estas modificaciones permitan observar la conformación del péptido mediante técnicas como espectroscopía de ultra-violeta visible, fluorescencia y dicroísmo circular tanto en su estado libre como en su interacción con la membrana lipídica. La interacción entre cromóforos permitirá mediante

Proyectos de TFM ofertados por la USC: resumenes explicativos

[1] Lostalé-Seijo, I., & Montenegro, J. (**2018**). Synthetic materials at the forefront of gene delivery. *Nature Reviews Chemistry*, *2*, 258–277. http://doi.org/10.1038/s41570-018-0039-1

[2] Lostalé-Seijo, I., Louzao, I., Juanes, M., & Montenegro, J. (**2017**). Peptide/Cas9 nanostructures for ribonucleoprotein cell membrane transport and gene edition. *Chemical Science*, *8*(12), 7923–7931. http://doi.org/10.1039/C7SC03918B

[3] Ver el video de youtube: https://www.youtube.com/watch?v=htET8-1Lx90

el efecto FRET observar la estabilidad del péptido en diferentes condiciones biológicas. La posible agregación del péptido también será observada mediante técnicas espectroscópicas. Finalmente se ensayará la entrega de pequeñas biomoléculas como RNA de cadena pequeña en células. La tecnología aquí propuesta tiene alcance a terapias génicas y vacunas basadas en que se encuentran en desarrollo en el grupo.[4]

**Capacidades y conocimientos recomendables que debe tener el estudiante para la realización de este proyecto**

Síntesis orgánica en general
Síntesis y purificación peptídica
Técnicas espectroscópicas como UV/CD/Fluorescencia

**Indíquese cualquier otra aclaración que se considere que pueda ayudar a los estudiantes en la elección del TFM**

Este trabajo permitirá al estudiante introducirse en el mundo de la nanotecnología ganando en su camino un sólido conocimiento en síntesis orgánica de moléculas fluorescentes y la síntesis y purificación de péptidos tanto en fase homogénea como heterogénea. El proyecto esta concebido primero a nivel molecular (cromóforos), transicionando a macromolecular (péptidos) y finalmente a supramolecular (auto ensamblaje). Gracias a esta estructuración se interactuará con las diferentes técnicas de cada escala como son: RMN, IR, masas, espectroscopia (nivel molecular); MALDI, TGA/DSC, cromatografía de exclusión por tamaños (nivel macromolecular) AFM, TEM, SEM (nivel nano). Esta situación permitirá al candidato ganar experiencia en una gran variedad de técnicas comunes en la investigación química actual y además involucrarse en un emocionante tema de investigación fundamental que se encuentra en la frontera actual del conocimiento.

Proyectos de TFM ofertados por la USC: resúmenes explicativos

[4] Para mas información del grupo de investigación visitar: www.javiermontenegrochemistry.com
Otras líneas del grupo centradas en el origen de la vida ver: https://www.youtube.com/watch?v=bGeb_gJQUfU

MASTERQO
MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGÁNICA

**PROPUESTA DE PROYECTO DE TRABAJO FIN DE MÁSTER (Curso académico 2021/22)**

## DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE

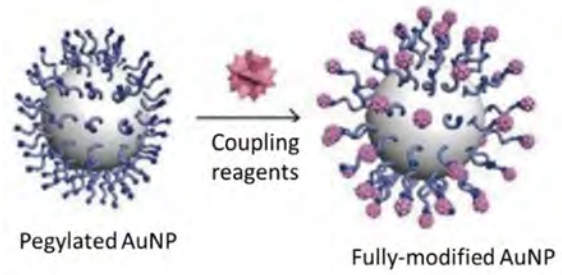

| | |
|---|---|
| **Apellidos y nombre del director(es) del proyecto:**<br>**Director: Manuel Paz Castañal**<br>**Codirector: Carlos Vázquez Vázquez** | |
| **Cargo:**<br>Profesor Titular | |
| **Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto:**<br>M. Paz: Dept. Química Orgánica. AEMAT (Agrupación estratéxica de Materiais da USC) Facultade de Química<br>C. Vázquez: Dept. Química Física. AEMAT (Agrupación estratéxica de Materiais da USC) Laboratorio NANOMAG | |
| **Teléfono directo**<br>881814218 | **e-mail**<br>manuel.paz@usc.es |


## DATOS DEL PROYECTO

**Título: Funcionalización post-sintética de nanopartículas de oro**

**Breve descripción de los objetivos, contenido del proyecto y tareas a realizar**

Las propiedades físicas, químicas y biológicas de las nanopartículas de oro (AuNPs) dependen de la forma y tamaño del núcleo de Au y de la funcionalización del ligando que las estabiliza. El método habitual para introducir diversidad funcional en AuNPs implica utilizar una diversidad de tioles modificados con los grupos funcionales de interés. En nuestro grupo hemos diseñado un ensayo de alto rendimiento (30 reacciones/ensayo) que permite evaluar la eficiencia de la modificación superficial post-sintética de AuNPs. Este ensayo ha conducido al desarrollo de una metodología que permite realizar esta modificación de forma cuantitativa, permitiendo la introducción post-sintética de una gran diversidad funcional en la superficie de AuNPs partiendo de un único ligando tiol. Entre las aplicaciones de este método se encuentran la modificación de carga (inversión, neutralización, zwitterionización o ampliación) y la introducción de grupos funcionales para química click. El estudiante que realice este TFM llevará a cabo una serie de experimentos de síntesis, modificación y caracterización de AuNPs con el objetivo de completar la parte experimental necesaria para una potencial publicación de los resultados.




**Capacidades y conocimientos recomendables que debe tener el estudiante para la realización de este proyecto**

Una sólida formación, tanto teórica como experimental, en química.

**Indíquese cualquier otra aclaración que se considere que pueda ayudar a los estudiantes en la elección del TFM**

Técnicas experimentales y de caracterización que se emplearán en el TFM: Síntesis y modificación de nanopartículas de oro, cromatografía de exclusión molecular, electroforesis (agarosa, PAGE), espectroscopía UV-vis, espectroscopía RMN, espectroscopia de correlación de fotones, microscopía electrónica de transmisión.

Proyectos de TFM ofertados por la USC: resúmenes explicativos

**PROPUESTA DE PROYECTO DE TRABAJO FIN DE MÁSTER (Curso académico 2021/22)**

## DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE


| | |
|---|---|
| **Apellidos y nombre del director(es) del proyecto:** Peña Gil, Diego y Castro Fernández, Silvia | |
| **Cargo:** Catedrático e Investigadora Postdoctoral | |
| **Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto:** CiQUS y Departamento de Química Orgánica, Universidad de Santiago de Compostela | |
| **Teléfono directo:** 8818 15718 | **e-mail**: diego.pena@usc.es |

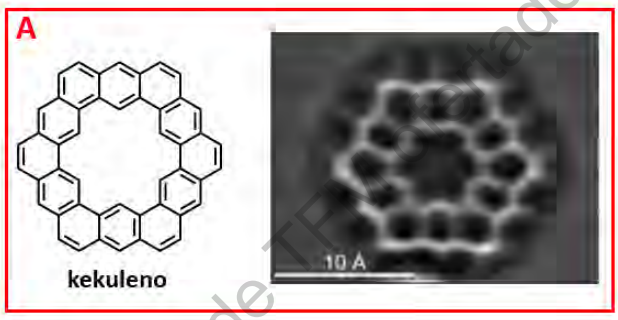

## DATOS DEL PROYECTO

**Título:** Hacia la síntesis de nuevos cicloarenos mediante reacciones de cicloadición de arinos

**Breve descripción de los objetivos, contenido del proyecto y tareas a realizar**

Los cicloarenos son hidrocarburos policíclicos aromáticos caracterizados por la fusión *cata* de anillos bencénicos que adoptan una disposición circular.[1] En los últimos años, estos compuestos han atraído un considerable interés de la comunidad científica por sus propiedades electrónicas y su relación estructural con los grafenos nanoporosos.[2] Recientemente, nuestro grupo de investigación ha sintetizado kekuleno (Figura A), una molécula icónica en química orgánica y uno de los cicloarenos más intensamente estudiados desde el punto de vista teórico, originalmente sintetizado en 1978.[3] Para ello, optimizamos la ruta sintética original empleando reacciones de cicloadición de arinos.[4] Además, en colaboración con IBM Research, caracterizamos moléculas individuales de kekuleno sobre superficie empleando microscopía de fuerza atómica (AFM) con resolución submolecular.

El objetivo de este proyecto consiste en la síntesis de otros cicloarenos relevantes empleando reacciones de cicloadición de arinos. Concretamente, se estudiará la optimización de la ruta de síntesis del cicloareno **1**, previamente descrito en 1986,[5] mediante el empleo de una secuencia de reacciones de cicloadición [4+2] entre arinos y benzofuranos (Figura B).





**Referencias**

1. J. C. Buttrick, B. T. King, *Chem. Soc. Rev.* **2017**, *46*, 7.
2. C. Moreno, M. Vilas-Varela, B. Kretz, A. García-Leuke, M. V. Costache, M. Paradinas, M. Panighel, G. Ceballos, S. O. Valenzuela, D. Peña, A. Mugarza, *Science* **2018**, *360*, 199.
3. F. Diederich, H. A. Staab, *Angew. Chem. Int. Ed.* **1978**, *17*, 372.
4. I. Pozo, Z. Majzik, N. Pavliček, M. Melle-Franco, E. Guitián, D. Peña, L. Gross, D. Pérez, *J. Am. Chem. Soc.* **2019**, *141*, 15488.
5. D. J. H. Funhoff, H. A. Staab, *Angew. Chem. Int. Ed.* **1986**, *25*, 742.


**Capacidades y conocimientos recomendables que debe tener el estudiante para la realización de este proyecto**

Interés, curiosidad y ganas de aprender

**Indíquese cualquier otra aclaración que se considere que pueda ayudar a los estudiantes en la elección del TFM**

Proyectos de TFM seleccionados por la CGC: resúmenes explicativos

**PROPUESTA DE PROYECTO DE TRABAJO FIN DE MÁSTER (Curso académico 2021/22)**

## DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE


| | |
|---|---|
| **Apellidos y nombre del director(es) del proyecto:** Dolores Pérez, Diego Peña | |
| **Cargo:** Catedrática de Universidad | |
| **Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto:** CiQUS y Departamento de Química Orgánica, Universidad de Santiago de Compostela | |
| **Teléfono directo:** 8818 15783 | **e-mail:** dolores.perez@usc.es, diego.pena@usc.es |

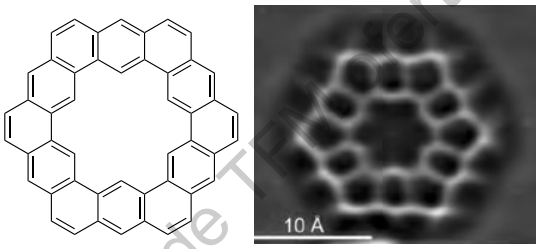

## DATOS DEL PROYECTO

**Título:** Hacia el antikekuleno: síntesis y reactividad de precursores de arino derivados de [*N*]fenilenos

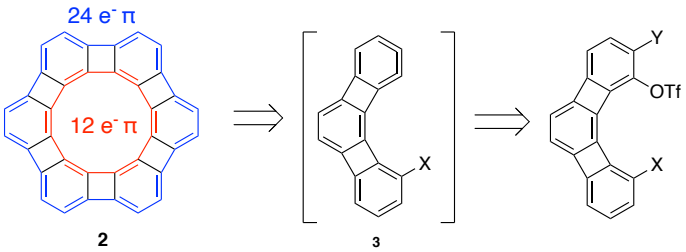
**Breve descripción de los objetivos, contenido del proyecto y tareas a realizar**

Los cicloarenos[1] constituyen una singular familia de hidrocarburos policíclicos conjugados (HPCs) que han atraído el interés de los químicos durante décadas, siendo plataformas ideales para abordar problemas científicos aún no resueltos entorno al concepto fundamental de la *aromaticidad*. Recientemente nuestro grupo de investigación, en colaboración con científicos de IBM Research (Zürich) realizó una aportación relevante a este campo, con la síntesis y el estudio, a nivel de moléculas individuales, del *kekuleno* (**1**),[2] compuesto icónico al que se había atribuido un posible carácter *superaromático*. En relación con este estudio, una línea de trabajo actual en nuestro grupo se dirige a la síntesis del *antikekuleno* (**2**), un HPC cíclico que nunca se ha conseguido preparar ni aislar, constituido por la alternancia de anillos de benceno y de ciclobutadieno *orto*-fusionados, al cual la presencia de dos circuitos 4n π electrones podría conferir carácter globalmente antiaromático.

En el contexto de una de nuestras líneas de investigación principales,[3] el presente proyecto plantea una aproximación a la síntesis del antikekuleno basada en la química de arinos. En concreto se propone como objetivo específico la obtención de precursores adecuados de los arinos **3**, derivados del [3]fenileno angular, y el estudio de su aplicación a la síntesis de intermedios policíclicos avanzados que puedan ser posteriormente empleados para la construcción *sobre superficie* del antikekuleno, con el apoyo de nuestros colaboradores expertos en técnicas SPM.




**1** Kekuleno (*JACS* **2019**)




**2** Antikekuleno **3**

X = H ó Cl
Y = TMS ó I

**Referencias**


1. Buttrick, J. C.; King, B. T., "Kekulenes, Cycloarenes, and Heterocycloarenes: Addressing Electronic Structure and Aromaticity through Experiments and Calculations". *Chem. Soc. Rev*. **2017**, *46*, 7.

2. Pozo, I.; Majzik, Z., Pavlicek, N.; Melle-Franco, M.; Guitián, E,; Peña, D., Gross, L. Pérez, D, "Revisiting Kekulene: Synthesis and Single-Molecule Imaging". *J. Am. Chem. Soc.* **2019**, *141*, 15488.

3. Ver publicaciones recientes y experiencia del grupo en https://www.usc.es/ciqus/es/grupos/commo.


**Capacidades y conocimientos recomendables que debe tener el estudiante para la realización de este proyecto**

Interés y experiencia en síntesis orgánica

**Indíquese cualquier otra aclaración que se considere que pueda ayudar a los estudiantes en la elección del TFM**

Proyectos de TFM ofertados por la USC. Resúmenes explicativos

**PROPUESTA DE PROYECTO DE TRABAJO FIN DE MÁSTER (Curso académico 2021/22)**

## DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE

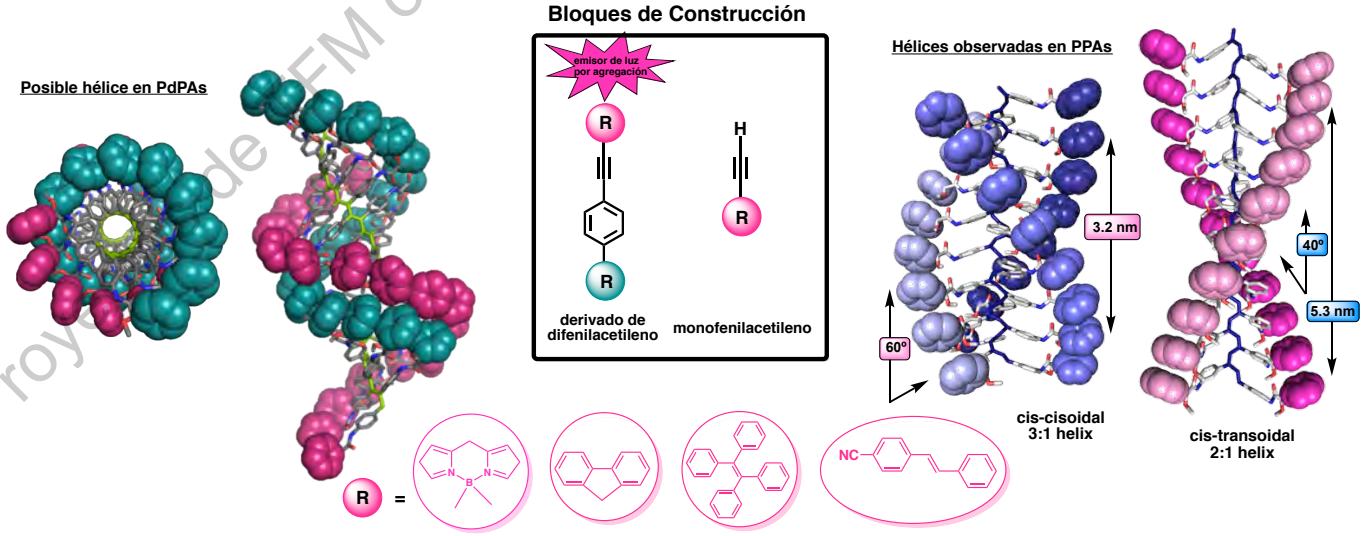

| | |
|---|---|
| **Apellidos y nombre del director(es) del proyecto:**<br>Quiñoá Cabana, Emilio / Freire Iribarne, Félix | |
| **Cargo:**<br>Catedrático / Profesor Contratado Doctor | |
| **Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto:**<br>Química Orgánica, Centro de Investigación en Química Biológica y Materiales Moleculares (CiQUS) | |
| **Teléfono directo**<br>**881815729/881815742** | **e-mail**<br>Emilio.quinoa@usc.es; felix.freire@usc.es |


## DATOS DEL PROYECTO

### Emisores de luz polarizada basados en Polidifenilacetilenos funcionalizados con emisores de luz inducida por agregación

Este Proyecto se enmarca en una línea de trabajo interdisciplinar, relacionada con la Química de Polímeros, la Química Estructural y la Química de Materiales

El objetivo de este proyecto es estudiar el ensamblaje de miméticos de difenilacetilenos donde uno de los anillos aromáticos ha sido sustituído por una molécula que actúa cómo emisores de luz inducida por agregación. De esta forma cuando se forme el polímero helicoidal, si la polimerización transcurre con una regioregularidad cabeza-cola, los emisores de luz por agregación quedarán en la estructura polimérica encima unos de otros haciendo que estos polímeros emitan de manera efectiva luz polarizada. La polarización de la luz va a venir determinada por la estructura helicoidal del polímero, así cambios en la elongación o sentido de giro de la hélice afectarán a este parámetro.




Referencias del grupo en el campo de los polímeros helicoidales (selección de los últimos 5 años): *1)* ***J. Am. Chem. Soc.*** **2016**, *138*, 9620–9628. 2) ***J. Am. Chem. Soc.*** **2018**, *140*, 667-674. 3) ***Angew. Chem. Int.***

Proyecto de TFM ofertados por la USC: resúmenes explicativos

***Ed.* 2018**, *57,* 3666–367, 4) ***J. Am. Chem. Soc.* 2018,** *140*, 12239–12246. 15) ***J. Am. Chem. Soc.* 2019**, 141, 8592-8598.6) ***Chem. Commun., 2019,** *55, 7906-7909*. 7) ***Angew. Chem. Int. Ed., 2019,** *58, 13365-13369*. 8) ***Angew. Chem. Int. Ed.,* 2020,** 59, 4537-4543. 9) ***Nanoscale Horiz.,* 2020,** *5*, 495-500. 10) ***Angew. Chem. Int. Ed., 2020,** *59, 9080-9087.* 11) ***Angew. Chem. Int. Ed., 2020,** *59, 8616-8622.* 12) ***Chemical Science, 2020 ,**11,* 7182-7187.13) ***Angew. Chem. Int. Ed., 2020,** *59*, 23724-23730. 14) ***Angew. Chem. Int. Ed., 2020**, 60, 8095-8103.* 15) ***Angew. Chem. Int. Ed., 2020,** 60, 9919-9924.* 16) ***Chem. Mater. 2021*,** *33*, 4805-4812.

**Webs:**

www.felixfreire.com

https://www.usc.es/ciqus/es/grupos/nanobiomol

**Capacidades y conocimientos recomendables que debe tener el estudiante para la realización de este proyecto**

Grado en Química

**Indíquese cualquier otra aclaración que se considere que pueda ayudar a los estudiantes en la elección del TFM**

El trabajo experimental de este Proyecto se desarrollará en los **laboratorios del Grupo NANOBIOMOL en el CIQUS.**

Proyectos de TFM ofertados por la USC: resúmenes explicativos

**PROPUESTA DE PROYECTO DE TRABAJO FIN DE MÁSTER (Curso académico 2021/22)**

## DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE


| | |
|---|---|
| **Apellidos y nombre del director(es) del proyecto:**<br>Saá Rodríguez, Carlos y Nappi, Manuel | |
| **Cargo:**<br>Catedrático y Investigador distinguido | |
| **Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto:**<br>Centro Singular de Investigación en Química Biolóxica e Materiais Moleculares (CiQUS) | |
| **Teléfono directo**<br>881815720; 881815710 | **e-mail**<br>carlos.saa@usc.es; manuel.nappi@usc.es |

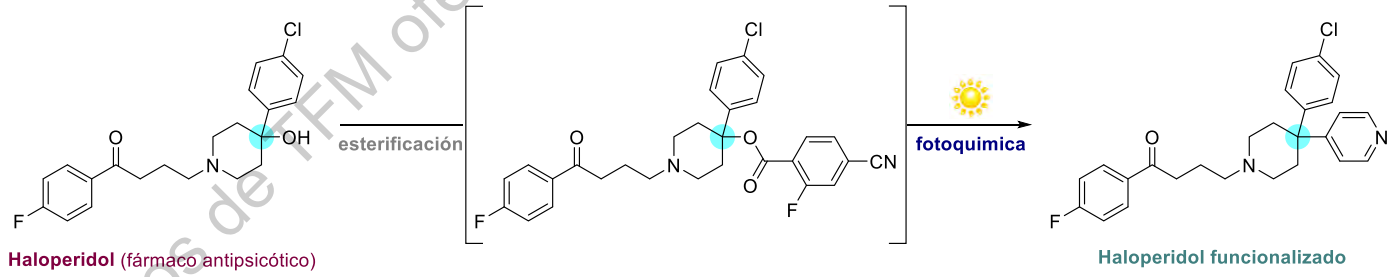

## DATOS DEL PROYECTO

**Título:** Activación fotoquímica de aminas promovida por luz visible

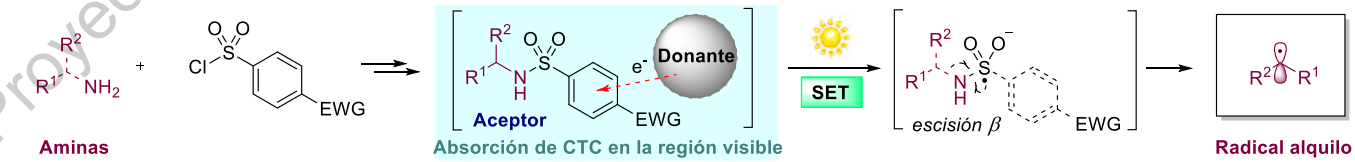
**Breve descripción de los objetivos, contenido del proyecto y tareas a realizar**

El diseño de transformaciones sostenibles es uno de los retos más importantes que persiguen los químicos en la industria y en la investigación académica. Muchos esfuerzos se han dedicado al desarrollo de reacciones orgánicas sostenibles, especialmente en los campos de la catálisis y la metodología sintética. La luz solar es un recurso natural único, una fuente de energía limpia no contaminante, abundante e infinitamente renovable. Por lo tanto, las transformaciones que pueden ser promovidas por la luz visible son muy deseables, ya que pueden ocurrir en condiciones de reacción suaves utilizando lámparas artificiales económicas e inofensivas o luz solar directa.

*A) activación y funcionalización fotoquimica de alcoholes*




*B) nueva metodología para la activación de aminas*




En nuestro grupo de investigación se está llevando a cabo el estudio de procesos fotoquimicos que permite la activación y funcionalización de compuestos organicos. En particular, hemos desallorando una metodologia innovadora para activar alcoholes y acoplar los correspondientes radicales alquilos con pyridinas (Figura A). En el marco de esta linea de investigacion, en este proyecto se pretende el desarrollo de una metodología que permita la activacion fotoquimica de aminas y la producción de los correspondientes radicales alquilos (Figura B). Estos últimos serán utilizados para hacer

Proyectos de TFM ofertados por la USC: resúmenes explicativos

reacciones de alquilación novedosas en los ámbitos sintético y bioquímico, incluyendo la bioconjugación ortogonal de ADN.

Al principio, el/la alumno/a sintetizará las sulfonamidas necesarias para la activación de aminas. Luego, se controlará la generación de los sistemas de transferencia de carga con los donantes más simples mediante espectroscopía de absorción UV-Visible; de hecho, si los complejos pueden absorber la luz visible. Una vez confirmada la formación de los sistemas deseados se estudiará la reactividad fotoquímica. En detalle, se confirmará la transferencia electrónica y la producción del radical alquilo, estudiando los productos de reacción obtenidos tras la exposición a la luz visible de los sistemas de transferencia de carga. Finalmente, se ensayarán distintas condiciones de reacción (disolvente, temperatura, aditivos, etc.) con el fin de mejorar el rendimiento del producto de alquilación.

El/La alumno/a realizará la determinación estructural de los compuestos obtenidos por técnicas de Resonancia Magnética Nuclear y espectrometría de masas. La distribución de productos en las diferentes reacciones se llevará a cabo mediante técnicas de Resonancia Magnética Nuclear y Cromatografía de Gases.

**Capacidades y conocimientos recomendables que debe tener el estudiante para la realización de este proyecto**

Grado en Química

Conocimientos básicos en síntesis orgánica

**Indíquese cualquier otra aclaración que se considere que pueda ayudar a los estudiantes en la elección del TFM**

Para más información sobre el grupo de investigación ver: https://nappichem.com/

Proyectos de TFM ofertados por la USC: resúmenes explicativos

**PROPUESTA DE PROYECTO DE TRABAJO FIN DE MÁSTER (Curso académico 2021/22)**

## DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE


| **Apellidos y nombre del director(es) del proyecto:** | |
|---|---|
| Saá Rodríguez, Carlos y Varela Carrete, Jesús Ángel | |
| **Cargo:** | |
| Catedrático y Profesor Titular de Química Orgánica | |
| **Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto:** | |
| Centro Singular de Investigación en Química Biolóxica e Materiais Moleculares (CiQUS) | |
| **Teléfono directo** | **e-mail** |
| 881815720; 881815719 | carlos.saa@usc.es; jesus.varela@usc.es |

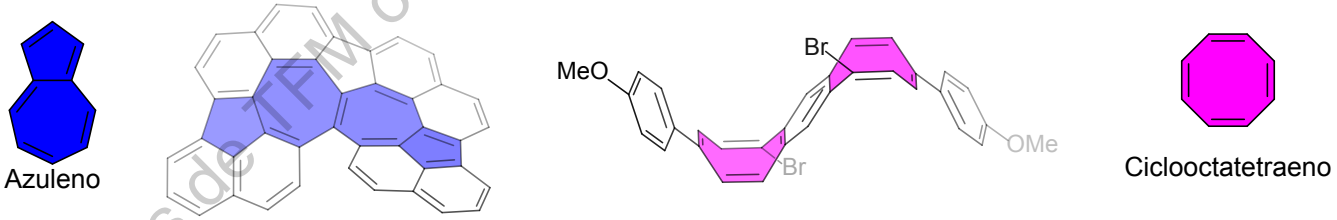

## DATOS DEL PROYECTO

**Título: Nuevas rutas sostenibles a HAPs no bencenoides**

**Breve descripción de los objetivos, contenido del proyecto y tareas a realizar**

Los hidrocarburos aromáticos policíclicos (HAPs) modificados mediante la introducción de anillos aromáticos no bencenoides como el azuleno o anillos no aromáticos como el ciclooctatetraeno (COT) permiten la obtención de sistemas nanografénicos curvos que alteran sensiblemente sus propiedades electrónicas y ópticas, lo que los convierte en ideales para la construcción de semiconductores.[1] Consecuentemente, el desarrollo de métodos sintéticos eficientes y sostenibles de HAPs no bencenoides es de gran relevancia y demanda. En nuestro grupo de investigación tenemos experiencia en la síntesis de benzociclooctatetraenos (bCOT's) mediante reacciones tándem de cicloadición [2+2+2] catalizadas por Ru de arileninos a dihidrobifenilenos seguidas de apertura radicalaria.[2]

En el presente TFM se pretenden explorar nuevas rutas sostenibles a HAPs no bencenoides mediante catálisis organometálica empleando acoplamientos cruzados y activaciones C-H en sus etapas clave.




Puedes encontrar más información del grupo de investigación GI1603 en: http://www.usc.es/gi1603/saa/.

[1] (a) Zhang, X.-S.; Huang, Y.-Y.; Zhang, J.; Meng, W.; Peng, Q.; Kong, R.; Xiao, Z.; Liu, J.; Huang, M.; Yi, Y.; Chen, L.; Fan, Q.; Lin, G.; Liu, Z.; Zhang, G.; Jiang, L.; Zhang, D. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2020**, *59*, 3529. (b) Medel, M. A.; Tapia, R.; Blanco, V.; Miguel, D.; Morcillo, S. P.; Campaña, A. G. *Angew. Chem., Int. Ed.* **2021**, *60*, 6094.

[2] Bello-García, J.; Padín D.; Varela, J. A.; Saá, C. *Org. Lett.* **2021**, *23*, 5539.

**Capacidades y conocimientos recomendables que debe tener el estudiante para la realización de este proyecto**

**Indíquese cualquier otra aclaración que se considere que pueda ayudar a los estudiantes en la elección del TFM**

Línea temática del TFM: catálisis organometálica y sostenibilidad

Proyectos de TFM ofertados por la USC: resúmenes explicativos

**PROPUESTA DE PROYECTO DE TRABAJO FIN DE MÁSTER (Curso académico 2021/22)**

## DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE


| | |
|---|---|
| **Apellidos y nombre del director(es) del proyecto:** Mercedes Torneiro / Massimo Lazzari | |
| **Cargo**: Profesor Titular de Química Orgánica / Profesor Titular de Química Física | |
| **Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto:** Departamento de Química Orgánica / CIQUS | |
| **Teléfono directo:** 881814224 | **e-mail:** mercedes.torneiro@usc.es |


## DATOS DEL PROYECTO

**Título: Interacción de materiales basados en tetrafenilmetano con fullerenos para aplicaciones electroquímicas.**

Los fullerenos constituyen una forma alotrópica del carbono que, a diferencia del diamante, grafito y grafeno, están constituidos por moléculas discretas con un número definido de átomos de carbono ($C_{60}$, $C_{70}$…). Estas moléculas presentan una estructura y propiedades muy peculiares, por su forma de caja esférica capaz de atrapar metales y clústeres en su interior (fullerenos endoédricos), que modulan sus propiedades electroquímicas, resultando de interés para aplicaciones como células electrovoltaicas o en electrocatálisis.[1]

En nuestro grupo de investigación llevamos un tiempo preparando materiales basados en tetrafenilmetano que presentan poros o cavidades bien definidas. Este trabajo ha estado financiado por varios proyectos nacionales y dio lugar a 3 tesis doctorales, una patente internacional y varios artículos científicos.

El objetivo de este trabajo es evaluar la interacción de los materiales desarrollados en el grupo (dendrímeros y polímeros microporosos) con fullerenos (ver estructuras en figura 1). Nuestra hipótesis basada en observaciones previas es que tanto el tamaño como la estructura de los poros en los materiales podrían ser adecuados para captar fullerenos en su interior. De ser correcto, resulta de gran interés para aplicaciones electroquímicas, y también para separar unos fullerenos de otros en base a su afinidad/complementaridad con las cavidades de los poros, un tema de gran importancia a la hora de aislar fullerenos vacíos y/o endoédricos, pues por lo general se obtienen como mezclas y su separación es muy complicada. Para el TFM se propone llevar a cabo un estudio preliminar básico, que consistirá en evaluar la afinidad de algunos materiales de tetrafenilmetano por $C_{60}$ y $C_{70}$, basándose en un análisis previo de la bibliografía. Si los resultados obtenidos son buenos, el proyecto tendrá un gran recorrido y podremos llevar a cabo una colaboración con un prestigioso grupo americano que está interesado en el resultado del mismo.

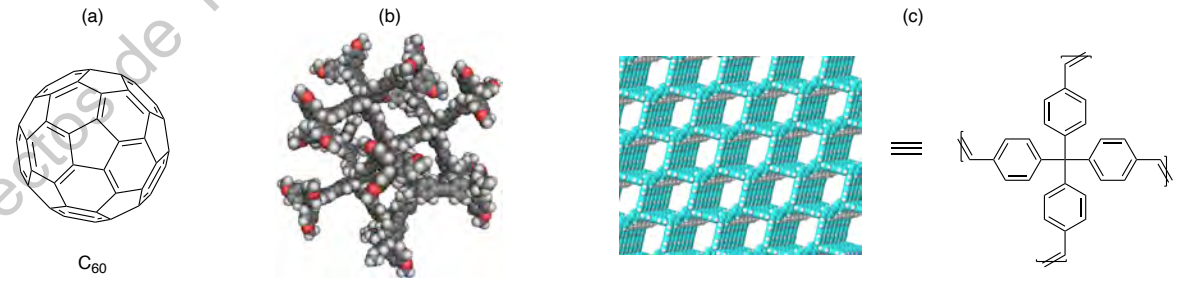



Figura 1. Ejemplos de un fullereno (a), y algunos de los materiales porosos basados en tetrafenilmetano sintetizados en el grupo: un dendrímero rígido (b) y un polímero microporoso (c).

[1] Echegoyen y col. *J. Am. Chem. Soc.* **2021**, *143*, 1203; *ibid* 6037; y trabajos que se citan.

**Capacidades y conocimientos recomendables que debe tener el estudiante para la realización de este proyecto**

Conocimiento de las técnicas básicas de laboratorio químico. Interés por aprender y por la investigación.

**Indíquese cualquier otra aclaración que se considere que pueda ayudar a los estudiantes en la elección del TFM**

Proyectos de TFM ofertados por la USC. Resúmenes explicativos

TFM-QO-17

**PROPUESTA DE PROYECTO DE TRABAJO FIN DE MÁSTER (Curso académico 2021/22)**

## DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE


**Apellidos y nombre del director(es) del proyecto:** M. Eugenio Vázquez / Soraya Learte-Aymamí

**Cargo:** MEV Prof. Titular / SLA Investigadora postdoctoral

**Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto:** Centro Singular de Investigación en Química Biolóxica e Materiais Moleculares (CiQUS) y Dept. Química Orgánica (USC).

**Teléfono directo:** 881 815 738 | **e-mail:** *eugenio.vazquez@usc.es*


## DATOS DEL PROYECTO

**Título: Identification of β-hairpin catalytic metallopeptides through SPOT combinatorial screening**

**Breve descripción de los objetivos, contenido del proyecto y tareas a realizar**

Developing artificial metalloenzymes with robust activity in living cells is a major research challenge at the interface between catalysis and cell biology. Towards this end, the group of Prof. Mascareñas has recently described an artificial bis-His Pd(II) α-helical peptide that promotes the depropargylation reaction of the fluorogenic probe HBTPQ in living cells (*1*). As an extension of this strategy, we aim to develop catalytic β-hairpin metallopeptides derived from the Tryptophan zipper (*Wzip*) family. The *Wzip* are a short (12- or 16-residues) monomeric β-hairpins, stabilized by interstrand Trp-Trp stacking, that exhibit reversible and highly cooperative folding typical proteins and have thus been proposed as minimal β-structures (*2*). Moreover, the NMR structure of these remarkable peptides has been determined (PDB: 1LE0), thus allowing the rational design of a focused combinatorial library using the SPOT method.

SPOT libraries, first reported in 1992 (*3*), are made by synthesizing peptides on planar matrix—typically cellulose sheets—by spotting small aliquots of solutions containing the different reagents onto defined positions on the support. The resulting array can be positionally addressed, therefore greatly simplifying the screening process (*4*). To our knowledge, the SPOT technique has never been used for the screening of catalytic metallopeptides, and thus the methodological development has potentially high relevance.

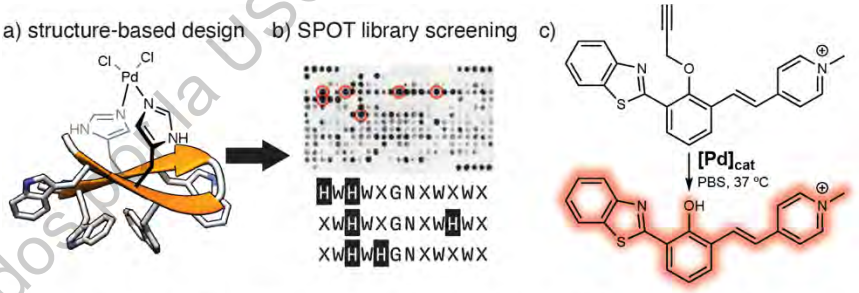



**Fig. 1**. a) Structure of the Wzip (1LE0) and potential location of coordinating His residues; b) SPOT library used to optimize the core WZip sequence. Coordinating His in the sequence are highlighted. c) screening depropargylation reaction of HBTPQ.

The student will synthesize and characterize the standard Trp-zipper hairpin (i.e., circular dichroism, fluorescence spectroscopy, Fig. 1a), and then synthesize and study a series of selected mutants from the SPOT peptide library (Fig. 1b). Selected peptides will be tested for catalytic activity against the model depropargylation reaction (Fig. 1c). Finally, those peptides that display high catalytic activity in vitro will be tested in cellular settings for internalization properties and their resilience under demanding cellular conditions.


1. S. Learte-Aymamí, C. Vidal, A. Gutiérrez-González, J. L. Mascareñas, Intracellular Reactions Promoted by Bis(histidine) Miniproteins Stapled Using Palladium(II) Complexes. *Angew. Chem. Int. Ed.* **59**, 9149–9154 (2020).
2. A. G. Cochran, N. J. Skelton, M. A. Starovasnik, Tryptophan zippers: Stable, monomeric β-hairpins. *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **98**, 5578–5583 (2001).
3. R. Frank, Spot-synthesis: an easy technique for the positionally addressable, parallel chemical synthesis on a membrane support. *Tetrahedron.* **48**, 9217–9232 (1992).
4. K. Hilpert, D. F. H. Winkler, R. E. W. Hancock, Peptide arrays on cellulose support: SPOT synthesis, a time and cost-efficient method for synthesis of large numbers of peptides in a parallel and addressable fashion. *Nat. Protoc.* **2**, 1333–1349 (2007).


**Capacidades y conocimientos recomendables que debe tener el estudiante para la realización de este proyecto.** No prior knowledge is required, other than a basic understanding of coordination chemistry and peptide chemistry and structure. The student will be provided with key literature and references to familiarize themselves with the project and will be guided and closely supervised on their daily experimental work by a senior PhD student.

**Indíquese cualquier otra aclaración que se considere que pueda ayudar a los estudiantes en la elección del TFM.** This project is a collaboration with the groups of Prof. Jean-Didier Maréchal (UAB, Barcelona, https://bit.ly/3jv3iZs), who will design the catalytic peptides, and the group of Dr. Maria Macías (*IRB*, Barcelona, https://bit.ly/2G2YV9g) for the structural analysis of the successful artificial metalloenzymes.

Proyectos de TFM ofertados por la USC: resúmenes explicativos