MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGANICA
MENCIÓN DE MÁSTER EXCELENTE XUNTA DE GALICIA

Máster universitario en Química Orgánica (M60)

Relación de Trabajos de Investigación (36 ECTS) ofertados en la UAM

CURSO ACADÉMICO 2025-2026

Director(es)	Título del proyecto
1. TORTOSA MANZANARES, Mariola; RIGOTTI, Thomas	*Síntesis enantioselectiva y validación biológica de nuevos bioisósteros de bencenos disustituidos en fármacos*
2. TORTOSA MANZANARES, Mariola; RIGOTTI, Thomas	*Desarrollo de nuevas reacciones radicalarias de acoplamiento con bioisósteros de bencenos enantioenriquecidos*
3. MARTINEZ DÍAZ, Victoria; GARCÍA CALVO, José	*Síntesis y resolución de Subftalocianinas quirales. Estudio de sus propiedades*
4. CÁRDENAS MORALES, Diego Jesús	*Desarrollo y estudio mecanístico de reacciones de interés sintético fotocatalizadas por complejos de Fe*
5. GARCÍA CALVO, José	*Derivados de perileno para aplicaciones en biología celular*
6. GARCÍA CALVO, José	*Compuestos ortogonales fluorescentes estudio de sus propiedades y aplicaciones*
7. NAVARRO BLASCO, Miquel	*Síntesis de ligandos P-estereogénicos hemilábiles y su aplicación en catálisis asimétrica de oro para la formación de nuevos enlaces carbono-carbono*
8. BLANCO FERNÁNDEZ, Matías; FRAILE CARRASCO, Alberto	*Polímeros reticulares basados en la reacción tiol-eno como soporte de nanopartículas metálicas catalíticas*
9. BLANCO FERNÁNDEZ, Matías	*Funcionalización fotoquímica [3+2] de nanotubos de carbono*
10. APARICIO HERNÁNDEZ, Fátima; VEIGA HERRERO, Jacobo	*Nanotubos Supramoleculares para la Encapsulación de Fármacos*

11. MARZO, Leyre	*Diseño de nuevos procesos organo-fotocatalíticos en síntesis orgánica*
12. MARZO, Leyre; MACLEAN, Ian	*Desarrollo de transformaciones electroquímicas sostenibles a partir de derivados 1,3-dicarbónilicos*
13. FERNÁNDEZ SALAS, Jose Antonio	*Desarrollo de nuevas metodologías electroquímicas para la formación de enlaces carbono-carbono*
14. FRAILE CARRASCO, Alberto; FERNÁNDEZ SALAS, Jose Antonio	*Desarrollo de nuevas metodologías asimétricas organocatalíticas basadas en interacciones de calcógeno*
15. GONZÁLEZ RODRÍGUEZ, David; RODRIGUEZ BAUDRU, Victor	*Sistemas π-Conjugados Supramoleculares para Células Solares Orgánicas Nanoestructuradas*
16. de JUAN GARRUDO, Alberto; TORRES CALVO, Beatriz	*Capsulas Moleculares Biomiméticas para el Reciclaje Químico de Polietileno Tereftalato (PET)*
17. de JUAN GARRUDO, Alberto; GIA BELDUMA, Allison Priscila	*Cajas Moleculares Biomiméticas de Porfirina: Control Conformacional y Alosterismo.*
18. URBANI, Maxence; TORRES CEBADA, Tomás	*Síntesis Dirigida de Porfirinas Expandidas para Aplicaciones en Electrónica Molecular y Nanomedicina*
19. ALONSO MONTERO, Inés; RODRÍGUEZ GARRIDO, Nuria	*Funcionalización directa de enlaces C(sp^3)–H empleando catálisis de cobalto*
20. CORPAS PARDO, Javier; GÓMEZ ARRAYÁS, Ramón	*Hacia una aproximación biomimética en reacciones de transferencia de átomo de hidrógeno (HAT) mediante fotocatálisis*
21. MARZO, Leyre; RODRÍGUEZ GARRIDO, Nuria	*Combinación de los avances en procesos en electroquímica y procesos de funcionalización C–H*
22. ADRIO SEVILLA, F. Javier	*Cicloadición 1,3-dipolar como etapa clave para la obtención estereoselectiva de macrociclos quirales*
23. ADRIO SEVILLA, F. Javier; RODRÍGUEZ GARRIDO, Nuria	*Síntesis de conjugados ciclopétido-BODIPY para aplicaciones en bioimagen*
24. COLLADO MARTINEZ, Alba; GUTIERREZ CONTRERAS, Kevin	*Aplicación de compuestos organometálicos como catalizadores en síntesis orgánica*
25. RIBAGORDA, María	*Preparación de sensores fotoactivables basados en diazaxantilidenos*
26. RODRÍGUEZ MORGADE, María Salomé; PÉREZ DE BUSTOS CANARIO, Gema	*Síntesis de materiales cromo-fluorogénicos basados en Subporfirazinas*

27. RODRÍGUEZ MORGADE, María Salomé	*Síntesis de fotosensibilizadores y fluorocromos activables basados en Subporfirazinas y compuestos referibles*
28. VALERA GONZÁLEZ, Jorge Santos; RODRÍGUEZ DURÁN, Jorge	*Autoensamblaje de sistemas π-conjugados en unidades supramoleculares discretas*
29. CORPAS PARDO, Javier; MAULEÓN PÉREZ, Pablo	*Nuevas reacciones catalíticas de formación de enlaces C-C mediante desoxigenación promovida por transferencia de átomo de hidrógeno (HAT)*
30. MAULEÓN PÉREZ, Pablo; MARCOS AYUSO, Guillermo	*Desarrollo de procesos catalíticos guiados por inteligencia artificial*
31. BOTTARI, Giovanni; RACCOSTA BERMÚDEZ, Sara	*Síntesis y estudio de cajas moleculares basadas en macrociclos de tipo "cyanostar*
32. DE LA TORRE PONCE, Gema; SÁNCHEZ FERNÁNDEZ, David	*Síntesis de cavidades metal-orgánicas de Pt(II)-ftalocianina para su aplicación en tratamientos contra el cáncer*
33. CID de la PLATA, Mª Belén	*Estudio de nuevas estrategias de preparación de derivados de ácidos carboxílicos con alenos en posición β enantioenriquecidos*
34. CID de la PLATA, Mª Belén; GONZALEZ PAREDES, Ana	*Síntesis de lípidos polares con propiedades de estabilidad aumentada: evaluación de su incorporación en nanopartículas lipídicas para el transporte de fármacos.*
35. DE LA ESCOSURA NAVAZO, Andrés; LUIS BARRERA, Javier	*Síntesis prebiótica de análogos de coenzimas y reactividad con compuestos de azufre*
36. TROYANO, Javier	*Transformaciones químicas controladas en geles de COFs*

MASTERQO
MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGANICA
MENCIÓN DE MÁSTER EXCELENTE XUNTA DE GALICIA

UAM Universidad Autónoma de Madrid

UNIVERSIDAD COMPLUTENSE MADRID

USC UNIVERSIDADE DE SANTIAGO DE COMPOSTELA

XUNTA DE GALICIA

PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2025-2026

DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE

Apellidos y nombre del director(es) del proyecto: Mariola Tortosa Manzanares y Thomas Rigotti	
Cargo: Profesora Titular y Contratado Posdoctoral Marie Curie	
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; thomas.rigotti@uam.es

DATOS DEL PROYECTO

Título: Síntesis enantioselectiva y validación biológica de nuevos bioisósteros de bencenos disustituidos en fármacos/Enantioselective synthesis and biological validation of disubstituted benzene bioisosteres in pharmaceuticals.

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

En química médica, los bioisósteros son grupos funcionales y unidades estructurales que producen efectos biológicos similares a los de otro grupo en un compuesto químico, y que tienen la capacidad de modular las propiedades fisicoquímicas de potenciales candidatos a nuevos fármacos. Solubilidad, potencia, estabilidad metabólica o afinidad con un receptor específico son propiedades que pueden ser mejoradas con la introducción de bioisósteros, obteniendo un fármaco más eficaz.[1] A lo largo de las últimas dos décadas, se ha observado un creciente interés en la industria farmacéutica por el uso de estructuras rígidas con hibridación sp^3 ya que estas pueden aportar tridimensionalidad, distancias y ángulos de enlace bien definidos que dan acceso a un nuevo e inexplorado espacio químico, Además, el grado de complejidad (medido como el porcentaje de carbonos con hibridación sp^3) y la presencia de centros estereogénicos está directamente relacionado con el índice de éxito en programas de desarrollo de nuevos fármacos.[2] Entre las diferentes unidades estructurales que podemos encontrar, los anillos aromáticos son las más habituales, presentes en casi la mitad de los fármacos basados en moléculas pequeñas. Por esta razón, en los últimos años, varias estructuras bicíclicas rígidas de hibridación sp^3 han sido identificadas y propuestas como bioisósteros de anillos aromáticos (Figura 1).[3] Además, la incorporación de esqueletos con hibridación sp^3 puede dar lugar a moléculas quirales y a la aparición de nuevos centros estereogénicos, así que el desarrollo de métodos sintéticos enantioselectivos para su construcción permitiría poder acceder a ambos enantiómeros y poder evaluar su actividad biológica. En este contexto, el primer método catalítico enantioselectivo para la síntesis de bioisósteros de benceno ha sido desarrollado por nuestro grupo de investigación, permitiendo la obtención de 1,5-biciclo[2.1.1]hexanos (BCHs) mediante el uso de un ácido de Lewis quiral en una reacción intramolecular de fotociclación [2+2] (Esquema 1).[4] Sin embargo, para acceder a otros tipos de sustitución y a los correspondientes biciclos enantioenriquecidos se necesita desarrollar nuevas herramientas sintéticas (Figura 2). Estas últimas, están siendo desarrolladas en nuestro grupo a través del uso de catálisis asimétrica mediada por metales de transición. En este *trabajo de fin de Máster* nos proponemos ampliar el rango de reacciones enantioselectivas para obtener nuevos bioisósteros que se incorporarán en la estructura de fármacos para obtener análogos con mejores propiedades fisicoquímicas y potencia más elevada.

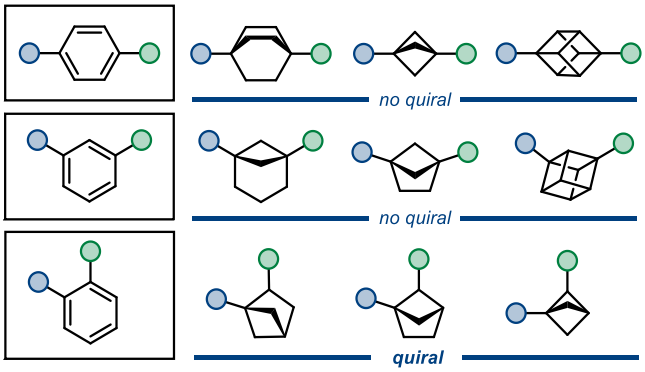
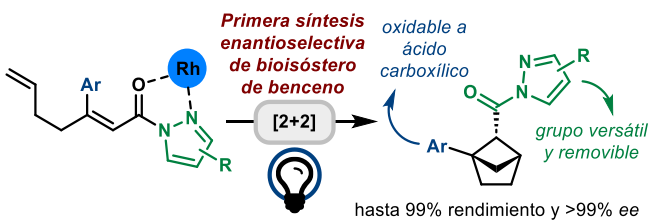


Figura 1. Ejemplos de bioisósteros de benceno disustituidos.



Esquema 1. Síntesis enantioselectiva de 1,5-biciclo[2.1.1]hexanos desarrollada por nuestro grupo de investigación (Rh = ácido de Lewis quiral).

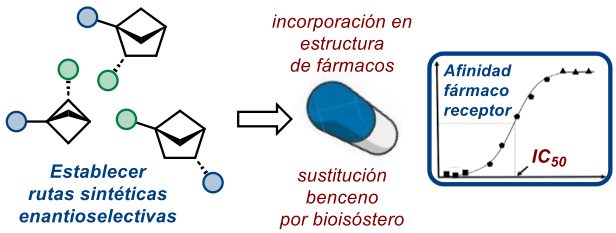


Figura 2. Rutas sínteticas, incorporación en fármacos y actividad biológica.

[1] M. A. M. Subbaiah, N. A. Meanwell, *J. Med. Chem*. **2021**, *64*, 14046.
[2] F. Lovering, J. Bikker, C. Humblet, *J. Med. Chem.* **2009**, *52*, 6752.
[3] P. K. Mykhailiuk, *Org. Biomol. Chem*. **2019**, *17*, 2839.
[4] P. Garrido-García, I. Quirós, P. Milán-Rois, S. Ortega-Gutiérrez, M. Martín-Fontecha, L. A. Campos, Á. Somoza, I. Fernández, T. Rigotti, M. Tortosa, *Nat. Chem*. **2025**, *17*, 734.

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

El estudiante debe tener 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, sistemas de purificación automática y caja seca.

El trabajo se desarrollará en el laboratorio L-501 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

MASTERQO
MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGANICA
MENCIÓN DE MÁSTER EXCELENTE XUNTA DE GALICIA

UAM Universidad Autónoma de Madrid

UNIVERSIDAD COMPLUTENSE MADRID

USC UNIVERSIDADE DE SANTIAGO DE COMPOSTELA

XUNTA DE GALICIA

PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2025-2026

DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE

Apellidos y nombre del director(es) del proyecto: Mariola Tortosa Manzanares y Thomas Rigotti	
Cargo: Profesora Titular y Contratado Posdoctoral Marie Curie	
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; thomas.rigotti@uam.es

DATOS DEL PROYECTO

Título: Desarrollo de nuevas reacciones radicalarias de acoplamiento con bioisósteros de bencenos enantioenriquecidos/Development of novel radical-based cross coupling reactions with enantioenriched benzene bioisosteres.

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

En química médica, los bioisósteros son grupos funcionales y unidades estructurales que producen efectos biológicos similares a los de otro grupo en un compuesto químico, y que tienen la capacidad de modular las propiedades fisicoquímicas de potenciales candidatos a nuevos fármacos. Solubilidad, potencia, estabilidad metabólica o afinidad con un receptor específico son propiedades que pueden ser mejoradas con la introducción de bioisósteros, obteniendo un fármaco más eficaz.[1] A lo largo de las últimas dos décadas, se ha observado un creciente interés en la industria farmacéutica por el uso de estructuras rígidas con hibridación sp^3 ya que estas pueden aportar tridimensionalidad, distancias y ángulos de enlace bien definidos que dan acceso a un nuevo e inexplorado espacio químico, Además, el grado de complejidad (medido como el porcentaje de carbonos con hibridación sp^3) y la presencia de centros estereogénicos está directamente relacionado con el índice de éxito en programas de desarrollo de nuevos fármacos.[2] Entre las diferentes unidades estructurales que podemos encontrar, los anillos aromáticos son las más habituales, presentes en casi la mitad de los fármacos basados en moléculas pequeñas. Por esta razón, en los últimos años, varias estructuras bicíclicas rígidas de hibridación sp^3 han sido identificadas y propuestas como bioisósteros de anillos aromáticos (Figura 1).[3] Además, la incorporación de esqueletos con hibridación sp^3 puede dar lugar a moléculas quirales y a la aparición de nuevos centros estereogénicos, así que el desarrollo de métodos sintéticos enantioselectivos para su construcción permitiría poder acceder a ambos enantiómeros y poder evaluar su actividad biológica. En este contexto, el primer método catalítico enantioselectivo para la síntesis de bioisósteros de benceno ha sido desarrollado por nuestro grupo de investigación, permitiendo la obtención de 1,5-biciclo[2.1.1]hexanos (BCHs) mediante el uso de un ácido de Lewis quiral en una reacción intramolecular de fotociclación [2+2] (Esquema 1).[4] Aunque estos bloques de construcción fueron empleados en la síntesis de análogos de fármacos, su síntesis se basó en reactividad convencional y establecida. En este contexto, el desarrollo de nuevos métodos de acoplamiento basados en química radicalaria podría permitir el uso de estos compuestos enantioenriquecidos en programas de descubrimiento de fármacos para generar diversidad estructural, dando acceso a un nuevo espacio químico que permanece inexplorado hasta el momento (Figura 2). Más especificadamente, el uso

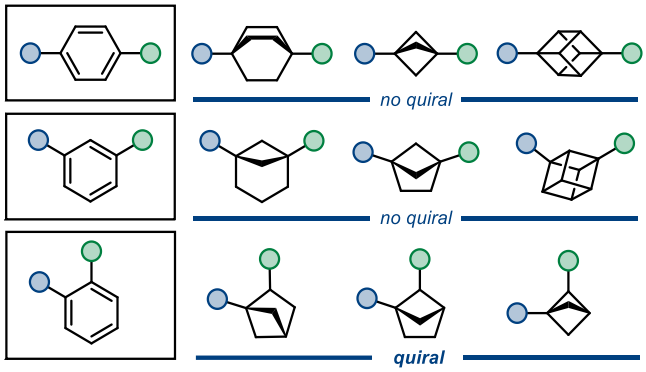
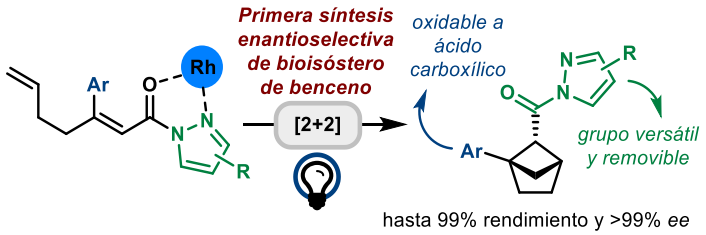


Figura 1. Ejemplos de bioisósteros de benceno disustituidos.



Esquema 1. Síntesis enantioselectiva de 1,5-biciclo[2.1.1]hexanos desarrollada por nuestro grupo de investigación (Rh = ácido de Lewis quiral).

de catálisis fotoredox y catálisis con transferencias de un solo electrón mediadas por metales de transición parecen estrategias adecuadas para alcanzar este objetivo. En este *trabajo de fin de Máster* nos proponemos ampliar el rango de reacciones que se pueden obtener a partir de varios bioisósteros enantioenriquecidos para proporcionar metodologías radicalarias de acoplamiento, estableciendo estas estructuras bicíclicas como bloques de construcción esenciales en nuevos programas de desarrollo de fármacos.

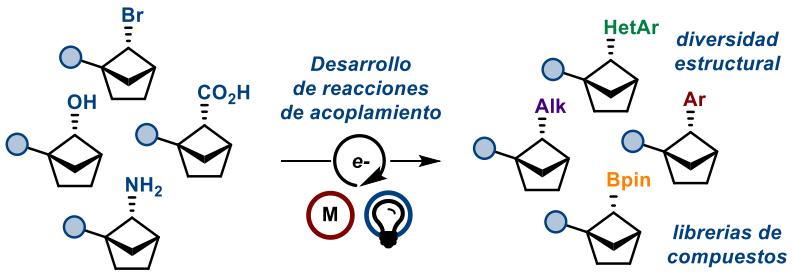


Figura 2. Creación de diversidad estructural a través de acoplamientos radicalarios.

[1] M. A. M. Subbaiah, N. A. Meanwell, *J. Med. Chem*. **2021**, *64*, 14046.
[2] F. Lovering, J. Bikker, C. Humblet, *J. Med. Chem.* **2009**, *52*, 6752.
[3] P. K. Mykhailiuk, *Org. Biomol. Chem*. **2019**, *17*, 2839.
[4] P. Garrido-García, I. Quirós, P. Milán-Rois, S. Ortega-Gutiérrez, M. Martín-Fontecha, L. A. Campos, Á. Somoza, I. Fernández, T. Rigotti, M. Tortosa, *Nat. Chem*. **2025**, *17*, 734.

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

El estudiante debe tener 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, sistemas de purificación automática y caja seca.

El trabajo se desarrollará en el laboratorio L-501 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 ORGANICA
MENCIÓN DE MÁSTER EXCELENTE XUNTA DE GALICIA

PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2025-2026

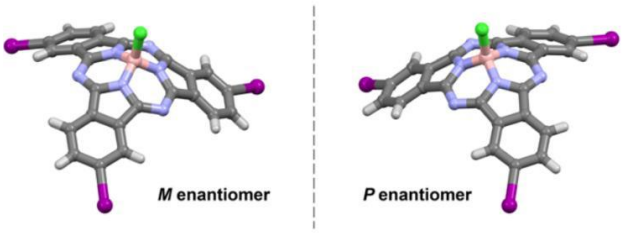
DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE

Apellidos y nombre del director(es) del proyecto: VICTORIA MARTINEZ DÍAZ / JOSÉ GARCIA CALVO	
Cargo: CATEDRÁTICA / AYUDANTE DOCTOR	
Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto: Química Orgánica	
Teléfono directo 2436/4701	**e-mail** victoria.martinez@uam.es y jose.garciac@uam.es

DATOS DEL PROYECTO

Título: Síntesis y resolución de Subftalocianinas quirales. Estudio de sus propiedades

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



La quiralidad es consecuencia de la geometría que presentan determinados objetos (o moléculas) para dar dos imágenes especulares no superponibles. Las Subftalocianinas (SubPcs) 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 las constituyen. Gracias a esto, cuando las SubPcs se encuentran adecuadamente sustituidas en la periferia (de tal manera que no exista ningún plano de simetría molecular) son moléculas quirales y configuracionalmente estables, dada su alta barrera de inversión.
Por otro lado, son moléculas aromáticas, altamente conjugadas, de gran interés en aplicaciones tecnológicas, como los dispositivos fotovoltaicos orgánicos. Para ello, es importante que presenten una absorción lo más desplazada posible hacia el rojo (alrededor de 650-700 nm), por ejemplo fusionando anillos de benceno.
En este proyecto se abordará la preparación de nuevas SubPcs quirales, en las que, partiendo de una SubPc simétrica (contiene un plano de simetría, y por tanto no es quiral), se origina una quiralidad intrínseca, por ejemplo, mediante la fusión de anillos de binaftilo al núcleo rígido del macrociclo mediante dos reacciones de Suzuki sucesivas.
Se abordará la formación de derivados con distintos sustituyentes periféricos en las otras dos subunidades de diiminoisoindol para modular las propiedades electrónicas del macrociclo, así como diferentes sustituyentes axiales (sobre el átomo de boro), con los cuales se modulará las propiedades de agregación de las SubPcs. Posteriormente, se estudiará la separación de los enantiómeros, tanto por métodos cromatográficos, como por métodos químicos (formación de diastereoisómeros).
Finalmente, se realizará una caracterización detallada 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
Buenos conocimientos de Química Orgánica y Determinación Estructural, y capacidad de trabajo en un laboratorio de química orgánica

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

MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGANICA
MENCIÓN DE MÁSTER EXCELENTE XUNTA DE GALICIA

PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2025-2026

DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE

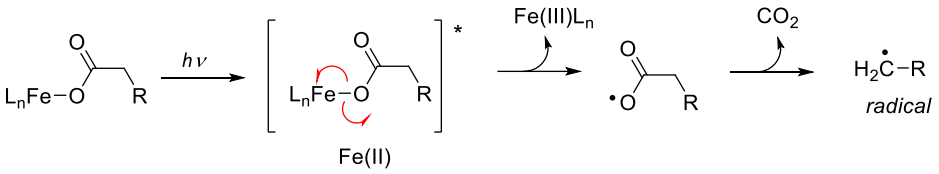
Apellidos y nombre del director(es) del proyecto: Cárdenas Morales, Diego J.	
Cargo: Catedrático	
Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto: Química Orgánica	
Teléfono directo: ext. 4358	**e-mail:** diego.cardenas@uam.es

DATOS DEL PROYECTO

Título: Desarrollo y estudio mecanístico de reacciones de interés sintético fotocatalizadas por complejos de Fe

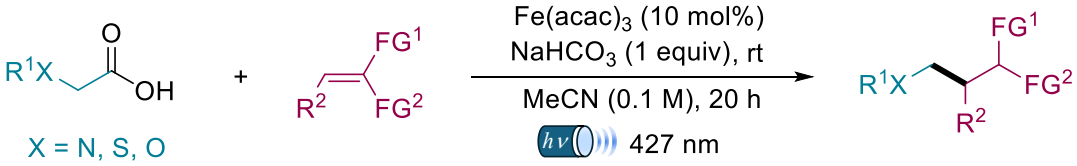
Breve descripción de los objetivos, contenido del proyecto y tareas a realizar

El proyecto trata del empleo de ácidos carboxílicos como precursores de radicales útiles en síntesis orgánica. Los ácidos son baratos, abundantes y pueden sustituir a haloalcanos para dar lugar a métodos más económicos y respetuosos con el medio ambiente. Se trata de un proyecto que mezcla la química organometálica con la fotoquímica para el desarrollo de reacciones útiles sintéticamente.
La coordinación de carboxilatos a ciertos complejos de Fe genera especies que se pueden excitar con luz visible. Tras la excitación se produce la ruptura homolítica del enlace Fe-O generando un radical carboxilo que se descompone dando lugar a un radical carbonado.

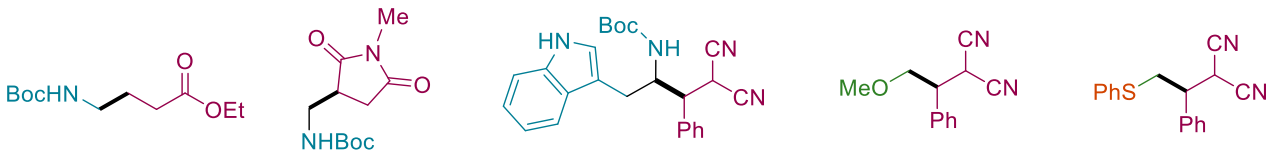


Este método es muy diferente al habitualmente empleado en fotocatálisis basado en el empleo de fotosensibilizadores orgánicos o de metales pesados muy caros y menos convenientes desde el punto de vista medioambiental (Ru e Ir).

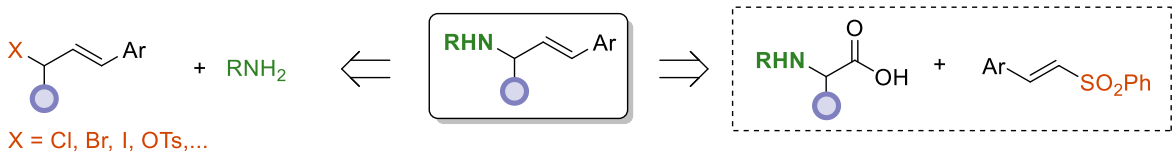
Recientemente hemos desarrollado la reacción de adición de radicales generados a partir de ácidos a alquenos deficientes en electrones. Más concretamente, se han empleado aminoácidos *N*-protegidos como precursores de los radicales, así como ácidos que presentan O y S en la posición α al grupo carboxilo. La reacción genera derivados sustituidos en la posición γ.



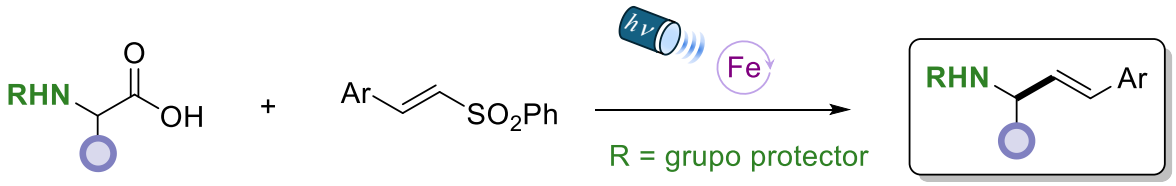
De este modo se pueden preparar derivados como los ejemplos siguientes (el nuevo enlace aparece en trazo más grueso):



El **objetivo** de este trabajo fin de máster es el desarrollo de una *nueva reacción de formación de alilaminas*, compuestos de enorme interés y que normalmente se preparan por reacción de sustitución nucleófila a partir de haluros de alilo, mediante la activación de α–aminóacidos naturales con luz y complejos de Fe. Los radicales formados se emplearán en la reacción de sustitución del grupo sulfonilo de alquenil-sulfonas para generar la alilamina.
De este modo, se emplea una desconexión diferente de la habitual para la preparación de alialminas, *formándose un enlace C-C en lugar del enlace C-N*:



Los resultados preliminares que hemos obtenido sore la reacción siguiente, empleando aminoácidos con el N protegido con grupo BOC son muy prometedores:



El estudiante llevaría a cabo un trabajo experimental en el que investigará el efecto de las condiciones de reacción en el rendimiento, y extenderá el proceso a diferentes aminoácidos protegidos en el grupo amino para ver la generalidad de la reacción. Tendrá que determinar la estructura de los derivados obtenidos mediante técnicas espectroscópicas y también llevará a cabo experimentos para tratar de obtener información del mecanismo de la reacción. Finalmente, conocerá cómo se pueden aplicar los cálculos computacionales al estudio de estas reacciones.
Al final del TFM, el estudiante conocerá las técnicas habituales de trabajo en un laboratorio de química orgánica y organometálica, de determinación estructural, así como presentar tanto de modo oral como escrito los resultados de la investigación.

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

El/la estudiante debe tener conocimiento de las técnicas de laboratorio y los conocimientos aprendidos en las asignaturas de Ampliación en Química Orgánica (3er curso) y Determinación Estructural (4º curso). Igualmente es recomendable el manejo fluido de las principales fuentes de documentación bibliográfica.

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

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

MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGANICA
MENCIÓN DE MÁSTER EXCELENTE XUNTA DE GALICIA

PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2025-2026

DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE

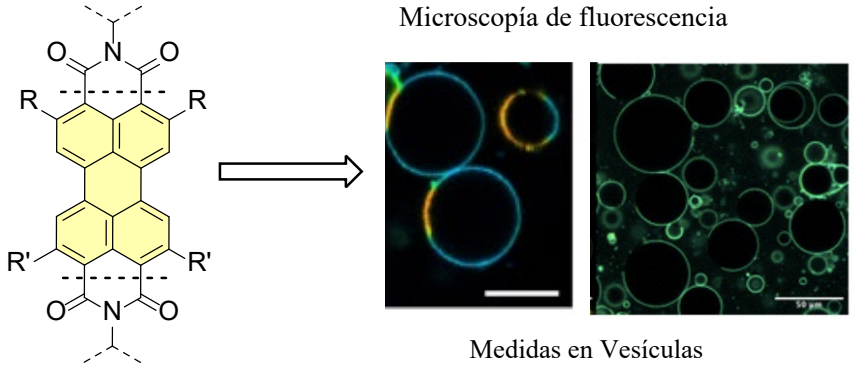
Apellidos y nombre del director(es) del proyecto: José García Calvo	
Cargo: Profesor ayudante doctor	
Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto: Química Orgánica	
Teléfono directo 914974701	**e-mail** jose.garciac@uam.es

DATOS DEL PROYECTO

Título: Derivados de perileno para aplicaciones en biología celular

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

Los objetivos del proyecto tratarán de combinar derivados de perileno para aplicaciones en biología celular. Para ello se sintetizarán una serie de derivados *orto*-sustituidos desde los boronatos para dar productos de manera regioselectiva. Estos a su vez se derivatizarán por reacciones de acoplamiento C-C para llevar a productos tipo dador aceptor y medir las aplicaciones como anfífilos para aplicaciones células biológicas; entre otras posibilidades.



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

El trabajo consistirá en síntesis orgánica clásica, caracterización y de absorción/fluorescencia. Los conocimientos del grado en química serían suficiente. Conocimientos o interés en vesículas/células biológicas podrían ayudar a la hora de realizar el trabajo, no siendo necesario y pudiéndose aprender durante el mismo.

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

Durante el TFM se centrará primero en la síntesis de los compuestos objetivo y medir propiedades. Una vez seleccionados los que den mejor resultados podrían aplicarse a diversos estudios. Por ello el estudiante no sólo aprendería síntesis orgánica sino que se propondrá medidas de fluorescencia, absorción UV-Vis y en vesículas (previo a medidas en células biológicas).

MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGANICA
MENCIÓN DE MÁSTER EXCELENTE XUNTA DE GALICIA

PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2025-2026

DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE

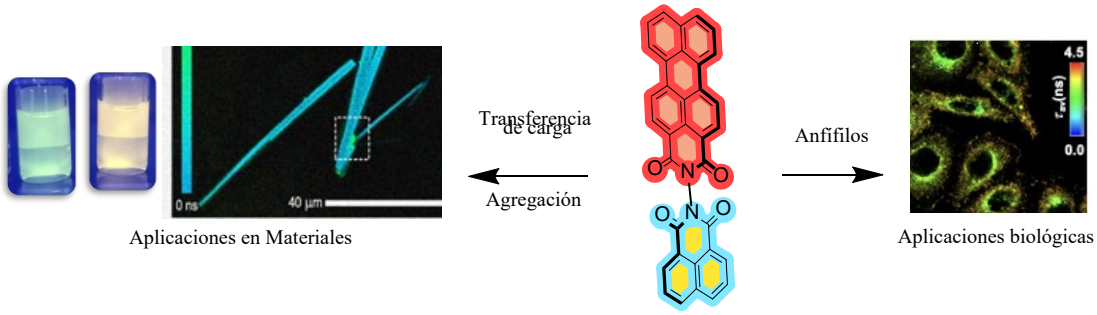
Apellidos y nombre del director(es) del proyecto: José García Calvo	
Cargo: Profesor ayudante doctor	
Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto: Química Orgánica	
Teléfono directo 914974701	**e-mail** jose.garciac@uam.es

DATOS DEL PROYECTO

Título: Compuestos ortogonales fluorescentes estudio de sus propiedades y aplicaciones

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

Los objetivos del proyecto tratarán de combinar derivados de perileno y naftaleno de manera ortogonal. Para ello se realizarán síntesis sencillas y específicas adecuándose a los resultados previos y que se vayan obteniendo. Durante el TFM se planteará la síntesis, caracterización, estudios de fotoluminiscencia (sólido/disolución), medidas de flurorescencia en vesículas y la posibilidad de medidas de microscopía de fluorescencia en sólidos y/o células.



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

El trabajo consistirá en síntesis orgánica clásica, caracterización, medidas electroquímicas y de absorción/fluorescencia. Los conocimientos del grado en química serían suficiente. Conocimientos o interés en medidas de materiales (agregación y medidas supramoleculares) o en vesículas/células biológicas, podrían ayudar a la hora de realizar el trabajo, no siendo necesario y pudiéndose aprender durante el mismo.

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

Durante el TFM se centrará primero en la síntesis de los compuestos objetivo y medir propiedades. Una vez seleccionados los que den mejor resultados podrían aplicarse a diversos estudios. Por ello el estudiante no sólo aprendería síntesis orgánica sino que se propondrá medidas de fluorescencia, absorción UV-Vis y dependiendo de los resultados medidas de electroquímica, agregación y/o en vesículas (previo a medidas en células biológicas). Si los compuestos resultan muy interesantes, en sus etapas finales se esperan medir aplicaciones en células solares y/o plantear la síntesis de derivados para por ejemplo PDT (terapia fotodinámica).

MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGANICA
MENCIÓN DE MÁSTER EXCELENTE XUNTA DE GALICIA

PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2025-2026

DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE

Apellidos y nombre del director(es) del proyecto: Miquel Navarro Blasco	
Cargo: Investigador Ramón y Cajal	
Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto: Universidad Autónoma de Madrid (UAM) – Facultad de Ciencias – Departamento de Química Orgánica Modulo 1 - Lab 401 C/ Francisco Tomás y Valiente 7 28049 Madrid, España	
Teléfono directo 4708	**e-mail** miquel.navarro@uam.es

DATOS DEL PROYECTO

Título: Síntesis de ligandos P-estereogénicos hemilábiles y su aplicación en catálisis asimétrica de oro para la formación de nuevos enlaces carbono-carbono.

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

Los ligandos donadores de fósforo como las fosfinas son un tipo de ligandos ampliamente usados en catálisis asimétrica o enantioselectiva. Este tipo de ligandos presenta una gran versatilidad ya que el elemento quiral puede encontrarse en diferentes sitios de la molécula como son los ejes y/o planos quirales y también en centros estereogénicos. Además, estos compuestos pueden ser fácilmente modificados durante su preparación y tiene una gran compatibilidad con la mayoría de los metales de transición, formando así complejos estables y catalizadores activos. Las fosfinas P-esterogénicas,[1] en las cuales el átomo de fósforo presenta tres sustituyentes diferentes, han sido ampliamente utilizados en catálisis asimétrica desde su uso pionero en hidrogenaciones asimétricas catalizadas por complejos de rodio descrito por el grupo de Knowles.[2] A pesar de presentar amplias posibilidades sintéticas, este tipo de fosfinas quirales suelen presentar un notable grado de rigidez tanto electrónica como estructural (Figura 1a), lo cual inhibe la posibilidad de eventos cooperativos entre ligando y metal/sustrato.

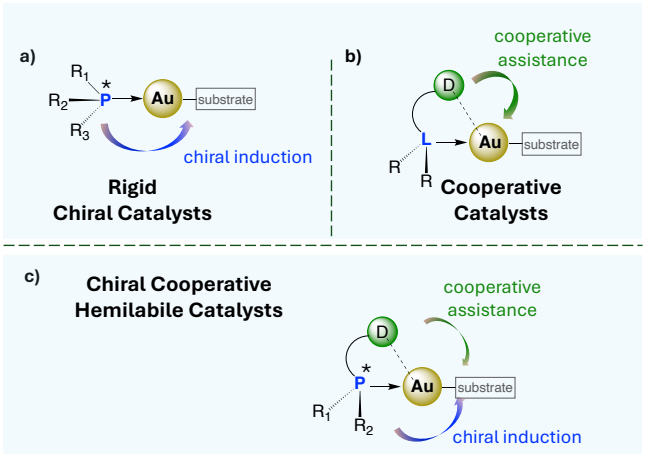


Figura 1. Estado del arte y objetivo genérico del proyecto

La introducción de grupos no inocentes en la estructura de los ligandos también ha sido estudiada por diferentes grupos de investigación, incluido en los ligandos tipo fosfina. La coordinación de estos ligandos a metales de transición permite a estos ligandos tener mayor flexibilidad electrónica y estructural que permite al ligando adaptarse a las necesidades específicas del centro metálico durante un ciclo catalítico, y permitiendo la estabilización de especies intermedias altamente reactivas que no habían sido identificadas o aisladas anteriormente. Además, esta flexibilidad permite nuevos modos de cooperación metal-ligando-sustrato,[3] facilitando así la formación o rotura de enlaces en diversas transformaciones catalíticas (*Figura 1b*).

Este proyecto de TFM pretende combinar estos dos principios (*Figura 1c*) con el objetivo de sintetizas nuevas fosfinas quirales hemilábiles (ligandos que pueden interactuar con el centro metálico de distintos modos debido a la incorporación de una

funcionalidad adicional en su estructura) y su coordinación a centros metálicos de oro con la finalidad de preparar catalizadores quirales para su uso en catálisis enantioselectiva. En este proyecto se ha diseñado la síntesis de fosfinas P-estereogénicas y la incorporación un grupo funcional hemilábil en su estructura que contenga un átomo donador de nitrógeno mediante rutas sintéticas ya establecidas.[4] La interacción de estos ligandos hemilábiles con el centro metálico de oro permitirá explorar reacciones elementales no habituales con este metal, como la adición oxidante o la eliminación reductora (*Figura 2*). Gracias a estos nuevos modos de coordinación y cooperación entre metal y ligando permitirá el desarrollo de nuevos procesos catalíticos de formación de enlaces C–C de manera asimétrica como las reacciones de hidroariliación, oxiarilación y aminoarilación enantioselectivas.[5]

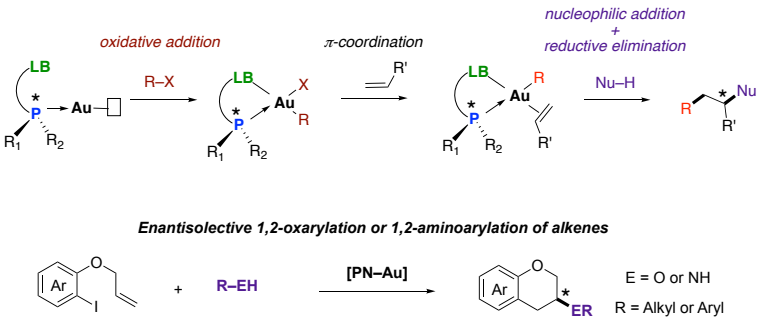


Figura 2. Reacciones elementales en complejos de oro con ligandos hemilábiles quirales y reacciones enantioselectivas catalizada por oro.

Los objetivos específicos de este TFM son:

- Síntesis y caracterización de una familia de ligandos fosfina quirales hemilábiles.
- Coordinación de los ligandos a centros metálicos de oro.
- Estudio estequiométrico de reacciones elementales en complejos de oro
- Ensayos catalíticos en reacciones de formación asimétrica de enlaces C–C

[1] a) A. Grabulosa, *P-Stereogenic Ligands in Entantioselective Catalysis*, 1st Ed. Cambridge **2011**.; b) P. Rojo, A. Riera and X. Verdaguer, *Coord. Chem. Rev.* **2023**, *489*, 215192.
[2] a) W. S. Knowles and M. J. Sabacky, *Chem. Commun.* **1968**, 1445; b) W. S. Knowles, *Acc. Chem. Res.* **1983**, *16*, 106.
[3] a) J. Khusnutdinova and D. Milstein, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2015**, *54*, 12236; b) M. R. Elsby and R. T. Baker, *Chem. Soc. Rev.* **2020**, *49*, 8933; c) J. Campos, *Nat. Chem. Rev.* **2020**, *4*, 696; d) A. M. Borys and E. Hevia, *Trends in Chem.* **2021**, *3*, 803; e) B. Chatterjee, W.-C. Chang, S. Jena and C. Werlé, *ACS Catal.* **2020**, *10*, 14024; f) M. Navarro, J. J. Moreno, M. Pérez- Jiménez and J. Campos. *Chem. Commun.* **2022**, *58*, 11220.
[4] a) A. R. Muci, K. R. Campos and D. A. Evans, *J. Am. Chem. Soc.* **1995**, *117*, 9075; b) S. Jugé, M. Stephan, J. A. Laffitte and J. P. Genêt, *Tetrahedron Lett.* **1990**, *31*, 6357. c) Zijlstra, H.; León, T.; de Cózar, A.; Fonseca-Guerrera, C.; Byrom, D.; Riera, A.; Verdaguer, X.; Bickelhaupt, F. M. *J. Am. Chem. Soc.* **2013**, *135*, 4483.
[5] a) C. C. Chintawar, V. W. Bhoyare, M. V. Mane, N. T. Patil, J. Am. Chem. Soc. **2022**, *144*, 7089; b) X. Ye, C. Wang, S. Zhang, Q. Tang, L. Wojtas, M. Li, Z. Shi, *Chem. Eur. J*. **2022**, *28*, e202201018.

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

Se recomiendo haber cursado las asignaturas de Química Orgánica de 2º, 3º y 4º curso, así como tener ciertos conocimientos en química organometálica y de determinación estructural.

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

El trabajo consiste en la preparación de una familia de ligandos y compuestos organometálicos quirales. Para ello, se requiere conocimientos en síntesis orgánica y organometálica y el empleo de técnicas de síntesis en atmósfera inerte (técnicas de Schlenk y cámara seca) tanto para su síntesis como para su aislamiento y purificación. Así pues, el estudiante adquirirá un alto grado de experiencia en síntesis orgánica y organometálica, así como en distintos métodos de purificación y caracterización incluyendo las técnicas habituales como la resonancia magnética nuclear (RMN) y la espectroscopia de infrarrojos (IR), y otras técnicas analíticas como análisis elemental, espectrometría de masas y HPLC.... Asimismo, estas técnicas permitirán también el seguimiento y la optimización de los procesos catalíticos y el estudio del mecanismo de reacción. Por lo tanto, el estudiante adquirirá experiencia en síntesis orgánica y organometálica y en distintos métodos de purificación y caracterización.

MASTERQO
MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGANICA
MENCIÓN DE MÁSTER EXCELENTE XUNTA DE GALICIA

UAM Universidad Autónoma de Madrid

UNIVERSIDAD COMPLUTENSE MADRID

USC UNIVERSIDADE DE SANTIAGO DE COMPOSTELA

XUNTA DE GALICIA

PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2025-2026

DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE

Apellidos y nombre del director(es) del proyecto: Fraile Carrasco, Alberto; Blanco Fernández, Matías	
Cargo: Profesor Titular, Profesor Ayudante Doctor	
Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto: Departamento de Química Orgánica, Facultad de Ciencias, Universidad Autónoma de Madrid, Calle Francisco Tomás y Valiente, 7, 28049 Madrid	
Teléfono directo: 91 497 3387 / 6687	**e-mail** Alberto.fraile@uam.es, matias.blanco@uam.es

DATOS DEL PROYECTO

Título: Polímeros reticulares basados en la reacción tiol-eno como soporte de nanopartículas metálicas catalíticas

Breve descripción de los objetivos, contenido del proyecto y tareas a realizar: Los polímeros porosos orgánicos son materiales emergentes que atraen cada vez más atención debido a sus propiedades. Son sistemas ligeros y porosos, diseñados a nivel molecular cuyos integrantes son átomos de tipo C, H, N, O, B, S y/o P, los cuales se unen mediante enlaces covalentes. Estos materiales pueden encontrar aplicación en dispositivos energéticos como baterías o supercondensadores, en dispositivos con aplicación biológica o como fotocatalizadores, ya que su diagrama de bandas generalmente resulta en un carácter semiconductor. Además, su esqueleto poliatómico les permite ser decorados con catalizadores metálicos de una manera muy sencilla. Sin embargo, la síntesis de estos materiales se lleva a cabo empleando reacciones polares con condiciones de reacción muy agresivas, como cantidades superestequiométricas de ácidos fuertes. El desarrollo de estrategias con condiciones más suaves, como por ejemplo, mediante métodos fotoquímicos o fotocatalíticos, sería muy deseable, ya que hasta el momento no existen ejemplos en la bibliografía en los cuales se haga uso de estos métodos de síntesis de materiales porosos.

El objetivo de este proyecto será el expandir el conocimiento de materiales sintetizados mediante la reacción tiol-eno fotoquímica para su aplicación en catálisis. El polímero orgánico poroso obtenido tendrá alto contenido en azufre, lo que permitirá la unión robusta con elementos metálicos capaces de catalizar reacciones, *e.g.*, acoplamiento C-C. En este trabajo se estudiará la síntesis de precursores, la funcionalización de los materiales y su caracterización fisicoquímica, así como la actividad catalítica modelo. Esta actividad catalítica se intentará expandir a tantos sustratos como permita el alcance de la reacción, junto con la reciclabilidad del material y qué posibles efectos sinérgicos aporta.

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 el uso de computación química, en 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 estar familiarizado con los conceptos impartidos en Ampliación de Química Orgánica y Determinación Estructural (3er curso), Ciencia de materiales y Nanoquímica (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.

MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGANICA
MENCIÓN DE MÁSTER EXCELENTE XUNTA DE GALICIA

PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2025-2026

DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE

Apellidos y nombre del director(es) del proyecto: Blanco Fernández, Matías	
Cargo: Profesor Ayudante Doctor	
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 6687	**e-mail:** matias.blanco@uam.es

DATOS DEL PROYECTO

Título: Funcionalización fotoquímica [3+2] de nanotubos de carbono
Breve descripción de los objetivos, contenido del proyecto y tareas a realizar: La reacción "**cicloadición dipolar 1,3**", también conocida como la "reacción de Prato", es uno de los protocolos de funcionalización de nanotubos de carbono más importantes. De hecho, esta reacción se sigue usando actualmente. Consiste en la formación *in situ* de un iluro de azometino mediante reacción entre un aldehído con un α-aminoácido, obteniendo un nanotubo decorado con un ciclo de 5 miembros. Si bien es una reacción poderosa y versátil que permite la modificación de las propiedades de los nanotubos y la introducción de una gran variedad de grupos funcionales, generalmente es una reacción lenta que se produce a altas temperaturas y en condiciones agresivas. Es por ello que sería muy deseable el desarrollo de una alternativa avanzada empleando condiciones más sostenibles. Este proyecto TFM contempla el desarrollo de la funcionalización fotoquímica [3+2] de nanotubos de carbono para la obtención de materiales híbridos decorados mediante anillos de 5 miembros. La variante fotoquímica de la reacción de Prato se llevará a cabo mediante la generación *in situ* de un iluro de azometino en condiciones fotoquímicas empleando aziridinas como precursor. Al iluminar, el ciclo de tres tenderá a foto-oxidarse, generando la especie reactiva capaz de reaccionar con el esqueleto del material. El proyecto contempla la síntesis de precursores de distinta naturaleza química (diferente electrónica, polaridad, efectos estérico,…), el estudio de las mejores condiciones de funcionalización fotoquímica, incluido el uso si es de fotocatalizadores si fuese necesario, la caracterización de las muestras obtenidas y la búsqueda de una aplicación del sistema bajo las mejores condiciones halladas. 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 el uso de computación química, en 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 estar familiarizado con los conceptos impartidos en Ampliación de Química Orgánica y Determinación Estructural (3er curso), Ciencia de materiales y Nanoquímica (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

MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGANICA
MENCIÓN DE MÁSTER EXCELENTE XUNTA DE GALICIA

PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2025-2026

DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE

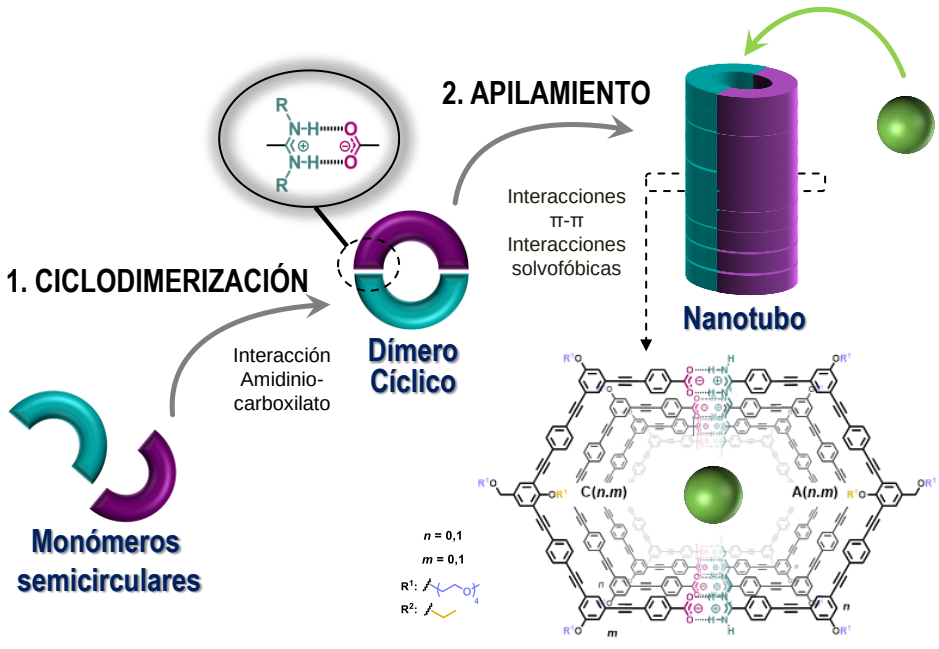
Apellidos y nombre del director(es) del proyecto: Aparicio Hernández Fátima, Veiga Herrero Jacobo	
Cargo: Investigadora Ramón y Cajal, Investigador Predoctoral	
Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto: Departamento de Química Orgánica, Universidad Autónoma de Madrid Facultad de Ciencias, C/Francisco Tomás y Valiente 7 – Módulo 11, Lab 602.	
Teléfono directo 914975807	**e-mail** fatima.aparicio@uam.es, jacobo.veiga@uam.es

DATOS DEL PROYECTO

Título: Nanotubos Supramoleculares para la Encapsulación de Fármacos

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

Las proteínas tubulares, tales como la tubulina, gramicidina o acuaporina, o virus como el virus del mosaico del tabaco, están entre los ejemplos más fascinantes de sistemas funcionales autoensamblados encontrados en la naturaleza. Dada su gran variedad de funciones y sus dimensiones a escala nanométrica, los científicos se están viendo cada vez más atraídos hacia el reto de diseñar materiales nanotubulares y nanoporosos. Posibles aplicaciones de dichos materiales con nanoespacios de dimensiones restringidas incluyen su uso como tamices moleculares en tecnologías de separación avanzada, encapsulación y almacenaje molecular selectivo, catálisis y sensores, o aplicaciones biomédicas como transportadores de sustancias y canales iónicos.



En este contexto, se pretende crear nanoestructuras tubulares solubles en agua con un tamaño y forma de poro ajustable a partir de monómeros π-conjugados equipados con grupos funcionales amidinio y/o carboxilato. Estos fragmentos, a través de interacciones no covalentes entre ambos grupos funcionales darán lugar a dímeros cíclicos que a su vez pueden apilarse originando un nanotubo cuyo poro permitirá la encapsulación selectiva al tamaño de sustancias.

El estudiante se encargará en primer lugar de sintetizar estos monómeros π-conjugados dotados con grupos amidinio y/o carboxilato, y estudiar su ensamblaje en agua hacia la formación de nanotubos mediante técnicas espectroscópicas avanzadas (RMN, UV-vis, CD, fluorescencia) y de microscopía (AFM, TEM). A continuación, se estudiará la función de estos nanotubos como contenedores mediante la realización de experimentos de encapsulación de diversos fármacos.

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

El alumno debe tener conocimientos de Química Orgánica, Determinación Estructural y de Espectroscopia. 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 al área de Nanoquímica e Ingeniería Molecular. 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, que engloba distintos conceptos incluso de Espectroscopia y hace uso de diversas técnicas que el alumno ha aprendido en asignaturas del grado en Química, o aprenderá en el Máster en Química Orgánica.

MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGANICA
MENCIÓN DE MÁSTER EXCELENTE XUNTA DE GALICIA

PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2025-2026

DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE

Apellidos y nombre del director(es) del proyecto: Leyre Marzo	
Cargo: Investigadora Ramón y Cajal	
Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto: Departamento de Química Orgánica	
Teléfono directo: 914976394	**e-mail: Leyre.marzo@uam.es**

DATOS DEL PROYECTO

Título: Diseño de nuevos procesos organo-fotocatalíticos en síntesis orgánica

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. Por otro lado, el desarrollo de nuevos **procesos organocatalíticos estereoselectivos** resulta de gran interés para la **industria farmacológica**, por la sencillez de los procesos, la suavidad de las condiciones de reacción, y la elevada compatibilidad con distintos grupos funcionales, permitiendo obtener moléculas complejas con un elevado control de la estereoselectividad.

En este proyecto se plantea el desarrollo de compuestos biológicamente activos mediante el desarrollo de nuevos procesos fotocatalíticos mediado por organocatalizadores carbénicos. Para ello se pretende desarrollar un sistema catalítico formado por un foto catalizador y un carbeno *N*-heterocíclico. Así, el fotocatalizador será un compuesto capaz de absorber luz visible (solar, bombillas ó LEDs), generando especies fotoexcitadas que pueden involucrarse en procesos de transferencia de electrones en un entorno quiral aportado por el organocatalizador carbénico. 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 como son espectrometría de absorción, de emisión tanto en el estado estacionario cómo en el estado excitado, Cvs, y rendimiento cuántico entre otros.

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 bajo la supervisión de Leyre Marzo, que cuenta con una amplia experiencia en síntesis orgánica, fotocatálisis y en la elucidación de mecanismos de reacción. El desarrollo de este TFM 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, como fluorescencia en estado excitado, lo que permite medir los tiempos de vida de las especies excitadas.

Además, se encuentran accesible diversos equipos analíticos como un potenciostato que permite medir potenciales redox, un SFC-masas, un GC, y una isolera para realizar columnas cromatográficas de forma automática, y dos equipos para determinar los excesos enantioméricos (un HPLC convencional y un SFC).

PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2025-2026

DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE

Apellidos y nombre del director(es) del proyecto: Leyre Marzo e Ian MacLean	
Cargo: Contratada Ramón y Cajal e investigador predoctoral	
Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto: Química Orgánica	
Teléfono directo: 914976394	**e-mail: leyre.marzo@uam.es; ian.maclean@uam.es**

DATOS DEL PROYECTO

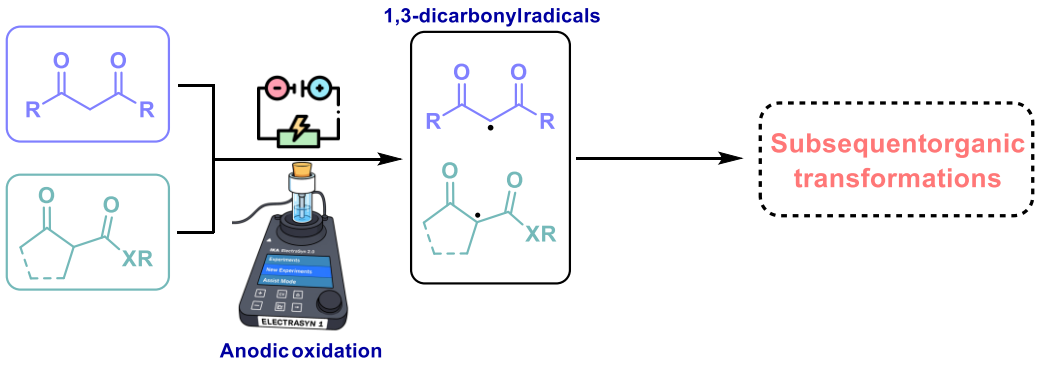
Título: Desarrollo de transformaciones electroquímicas sostenibles a partir de derivados 1,3-dicarbónilicos

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

Uno de los principales retos de la investigación actualmente consiste en el desarrollo de nuevos métodos más sostenibles y eficientes. En este sentido, es importante poder contar con fuentes de energía alternativas a los recursos fósiles. Así, el empleo de electrones provenientes de la electricidad como fuente de activación de una transformación química resulta de gran interés, lo que ha provocado que en los últimos años la electroquímica haya ido ganando interés e importancia en síntesis orgánica. Además, la electroquímica presenta una ventaja fundamental, ya que permite llevar a cabo varias etapas de oxidación o reducción de manera simultánea, abriendo la puerta a transformaciones no accesibles mediante otras metodologías, y evitando el empleo de agentes oxidantes o reductores tradicionales; de esta forma, se simplifican las condiciones experimentales, se mitiga la generación de residuos químicos, y se consiguen procesos altamente tolerantes con diversos grupos funcionales.

Los derivados 1,3-dicarbonílicos son una clase de unidades sintéticas económicas y fácilmente accesibles que se emplean con frecuencia en la química orgánica sintética. Mediante oxidación anódica, éstos pueden dar lugar a radicales 1,3-dicarbonílicos y posteriormente reaccionar con captadores de electrones para formar moléculas complejas en condiciones suaves. Actualmente en el grupo de investigación, existe una línea de trabajo centrada en el desarrollo de nuevas metodologías electroquímicas que involucren la activación de estas unidades para acceder a transformaciones de interés sintético.

En este contexto, el presente Trabajo de Fin de Máster se enmarca en el estudio de nuevas transformaciones promovidas electroquímicamente a partir de compuestos 1,3-dicarbónilicos. Se abordará la exploración de procesos redox mediados por electricidad que permitan acceder a nuevas estructuras moleculares mediante acoplamientos radicalarios, funcionalizaciones C–H o ciclaciones, en función del sistema y condiciones empleados. El diseño experimental incluirá tanto la optimización de parámetros electroquímicos (tipo de electrodo, disolvente, electrolito, control de potencial o corriente, etc.) como el estudio de la reactividad de distintos sustratos modelo.



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 (www.uam.es/jose.aleman), 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, como fluorescencia en estado excitado, lo que permite medir los tiempos de vida de las especies excitadas.

El grupo cuenta también con un equipo para medir potenciales redox, un SFC-masas, un GC, y tres isoleras para realizar columnas cromatográficas de forma automática, y dos equipos para determinar los excesos enantioméricos (un HPLC convencional y un SFC).

Fecha: 16/7/2025

Firma de los directores del proyecto:

Leyre Marzo Puerta

Ian MacLean Gariboldi

MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGÁNICA

PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2025-2026

DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE

Apellidos y nombre del director(es) del proyecto: Jose A. Fernández Salas	
Cargo: Profesor permanente laboral	
Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto: 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 y electrocatalíticos orientado a la síntesis de compuestos potencialmente bioactivos o con potencial sintético de una forma más segura, eficaz y responsable con el medio ambiente, incluyendo metodologías enantioselectivas.

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, exposición de resultados 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: 11-07-2025

Firma de los directores del proyecto:

Jose A. Fernández Salas

MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGÁNICA

PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2025-2026

DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE

Apellidos y nombre del director(es) del proyecto: Alberto Fraile y Jose A. Fernández Salas	
Cargo: Profesor titular y profesor permanente laboral	
Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto: 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: 914973877 y 914975977	**e-mail:** alberto.fraile@uam.es y j.fernandez@uam.es

DATOS DEL PROYECTO

Título: Desarrollo de nuevas metodologías asimétricas organocatalíticas basadas en interacciones de calcógeno

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

Los crecientes desafíos en el tratamiento de enfermedades emergentes y existentes requieren productos farmacéuticos con una mayor complejidad molecular para mejorar la potencia, la selectividad y las propiedades físicas deseables. Un avance clave en este ámbito es la creciente prevalencia de candidatos a fármacos que contienen uno o más centros asimétricos. El mercado de los medicamentos quirales está en expansión, lo que hace esencial el desarrollo de nuevas tecnologías enantioselectivas para reducir los residuos asociados a los racematos. Sin embargo, la síntesis de fármacos enantioméricamente puros sigue presentando limitaciones, lo que subraya la necesidad de enfoques enantioselectivos novedosos. A pesar de los avances significativos en el campo, la organocatálisis aún enfrenta desafíos no resueltos, particularmente en términos de eficiencia y aplicabilidad general.

Este TFM se estudiará un nuevo método de activación organocatalítico. En este TFM se plantea el desarrollo de nuevos organocatalizadores con la capacidad de activar de una manera no convencional y novedosa, basada en interacciones entre calcógenos (azufre, selenio…), imitando interacciones que existen de manera natural en complejos proteína-ligando. De esta manera y basado en este nuevo modo de activación, se desarrollará una nueva metodología asimétrica organocatalítica enfocada en la preparación de compuestos con interés sintético. Además, este TFM tiene 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, 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, exposición de resultados 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: 11-07-2025

Firma de los directores del proyecto:

Alberto Fraile

Jose A. Fernández Salas

MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGANICA
MENCIÓN DE MÁSTER EXCELENTE XUNTA DE GALICIA

PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2025-2026

DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE

Apellidos y nombre del director(es) del proyecto: González Rodríguez, David y Rodriguez Baudrú, Victor

Cargo: Catedrático, Investigador Predoctoral

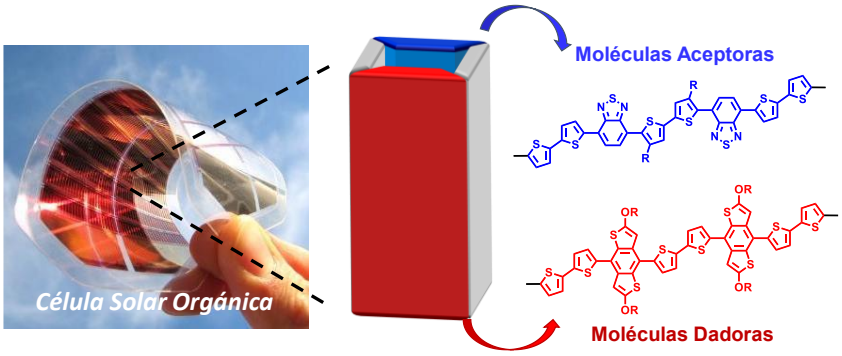
Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto:
Departamento de Química Orgánica, Universidad Autónoma de Madrid
Facultad de Ciencias, C/Francisco Tomás y Valiente 7 – Módulo 11, Lab 602.

Teléfono directo: 914972778	**e-mail:** david.gonzalez.rodriguez@uam.es

DATOS DEL PROYECTO

Título: Sistemas π-Conjugados Supramoleculares para Células Solares Orgánicas Nanoestructuradas

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. Siguiendo una estrategia parecida a la empleada en los sistemas naturales fotosintéticos, pretendemos organizar dichas moléculas de forma adecuada en la escala nanométrica con el fin de optimizar distintos parámetros que influyen en la eficiencia fotovoltaica. A través de procesos sintéticos y catalíticos modernos, el/la alumno/a llevará a cabo la síntesis de moléculas π-conjugadas de naturaleza dadora o aceptora de electrones y las dotará de información supramolecular, mediante el acoplamiento de distintos 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 debería tener interés por temas de Ingeniería Molecular y por la aportación de la Química Orgánica a otras áreas de la Ciencia: Química Supramolecular, Materiales Nanoestructurados, Nanoquímica, Optoelectrónica Molecular, etc. 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 Máster en Química Orgánica.

MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGANICA
MENCIÓN DE MÁSTER EXCELENTE XUNTA DE GALICIA

PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2025-2026

DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE

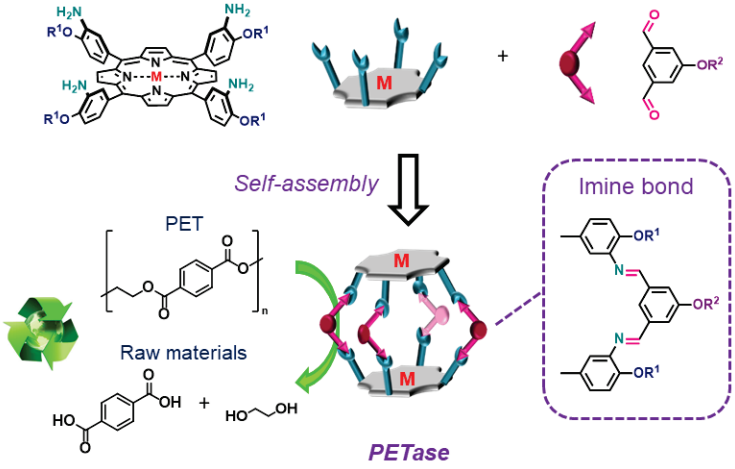
Apellidos y nombre del director(es) del proyecto: Alberto de Juan Garrudo, Beatriz Torres Calvo	
Cargo: Profesor Ayudante Doctor	
Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto: Departamento de Química Orgánica, Universidad Autónoma de Madrid Facultad de Ciencias, C/Francisco Tomás y Valiente 7 – Módulo 11, Lab 602.	
Teléfono directo 914973758	**e-mail:** alberto.dejuan@uam.es

DATOS DEL PROYECTO

Título: Capsulas Moleculares Biomiméticas para el Reciclaje Químico de Polietileno Tereftalato (PET)

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

Durante las últimas décadas, la producción de polímeros sintéticos se ha incrementado exponencialmente y a pesar de su gran utilidad, grandes cantidades de plásticos se acumulan como residuos provocando un severo problema medioambiental. El ***polietileno tereftalato*** representa el 17% del consumo global de plásticos, por lo que un eficiente ***reciclado terciario*** (reciclaje químico) de este polímero es esencial para abordar el problema mediante ***economía circular***. Recientemente, el uso de ***enzimas*** conocidas como "***PETasas***" producidas por bacterias capaces de hidrolizar grupos éster, que están presentes en el esqueleto de poliésteres, ha surgido como alternativa para el reciclaje de PET. Sin embargo, la baja estabilidad de dichas enzimas representa un problema para su aplicación.



Este trabajo se engloba en un proyecto que pretende emular estos modelos enzimáticos y desarrollar sistemas moleculares nanoestructurados dotados de cavidades catalíticas modulables. En concreto, se pretende estudiar procesos de reconocimiento, encapsulación selectiva e hidrólisis de análogos sintéticos de PET en el interior de ***cápsulas autoensambladas biomiméticas***, donde dos centros catalíticos de metalo-porfirina se encontrarían enfrentados de manera cofacial. El/la alumno/a se encargaría en primer lugar de sintetizar estos macrociclos π-conjugados, dotarlos de información supramolecular, para que, en combinación con los ligandos complementarios sean capaces de ensamblarse en las cajas diseñadas a través de métodos avanzados de química covalentes dinámica. 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.

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

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 ORGANICA
MENCIÓN DE MÁSTER EXCELENTE XUNTA DE GALICIA

PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2025-2026

DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE

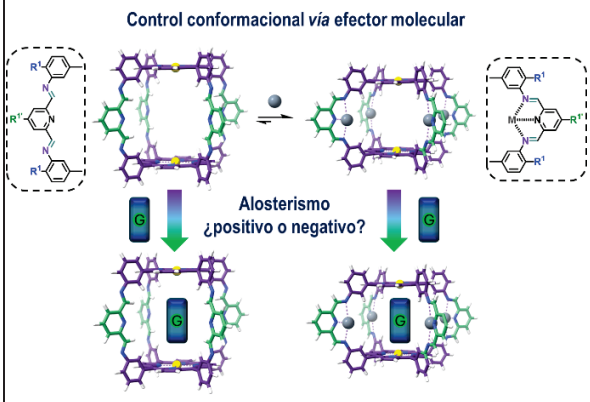
Apellidos y nombre del director(es) del proyecto: Alberto de Juan Garrudo, Allison Priscila Gia	
Cargo: Profesor Ayudante Doctor	
Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto: Departamento de Química Orgánica, Universidad Autónoma de Madrid Facultad de Ciencias, C/Francisco Tomás y Valiente 7 – Módulo 11, Lab 602.	
Teléfono directo 914973758	**e-mail:** alberto.dejuan@uam.es

DATOS DEL PROYECTO

Título: Cajas Moleculares Biomiméticas de Porfirina: Control Conformacional y Alosterismo.

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

El ***alosterismo*** constituye un mecanismo fundamental en los ***sistemas biológicos***, al facilitar la regulación precisa y eficiente de la actividad enzimática y proteica. A través de ***modificaciones conformacionales inducidas por efectores alostéricos***, las proteínas pueden ajustar su funcionalidad en respuesta a variaciones en el entorno celular, sin necesidad de recurrir a la síntesis o degradación de moléculas. Muchas de las estructuras biológicas reguladas por mecanismos alostéricos, implicadas en procesos catalíticos y de transporte (*catalasas*, *hemoglobina*, *mioglobina*, etc), se caracterizan por la presencia de derivados de **metaloporfirina** en sus centros activos o de unión. Estas metaloproteínas presentan 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 modulables** con diferentes propiedades. En concreto, en este TFM se pretende estudiar fenómenos alostéricos que puedan modular la capacidad de encapsulación de sistemas autoensamblados que presentan una nanocavidad bien definida, conformados por dos unidades de metaloporfirina que actúan como centros de reconocimiento, y que además presentan sitios de unión diferenciados para los efectores moleculares, lo que permitirá inducir respuestas conformacionales controladas que afectan directamente sus propiedades de encapsulación. El/la alumno/a se encargaría en primer lugar de sintetizar metaloporfirinas de Zn, dotarlas de información supramolecular, para que, en combinación con otros ligandos sean capaces de ensamblarse en las cajas diseñadas a través de enlaces covalentes dinámicos. En segundo lugar, se estudiaría el proceso de autoensamblaje y se aislará el receptor biomimético. Posteriormente, se evaluará el cambio conformacional inducido por distintos efectores moleculares. Finalmente, se llevarán a cabo estudios supramoleculares de tipo huésped-anfitrión, tanto en presencia como en ausencia de efectores, con el fin de analizar posibles efectos alostéricos. Para ello, se emplearán diversas técnicas espectroscópicas avanzadas (RMN, UV-vis, CD, fluorescencia).

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, he interés por estas materias en general y por su aportación a otras áreas de la Ciencia. 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

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) 2025-2026

DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE

Apellidos y nombre del director(es) del proyecto: Maxence Urbani/Tomás Torres Cebada	
Cargos: Investigador/Catedrático Emérito	
Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto: Instituto IMDEA-nanociencia, C/ Faraday, 9, Ciudad universitaria de Cantoblanco, 28049 Madrid/Departamento de Química Orgánica de la UAM	
Teléfono directo 606101393	**e-mail** tomas.torres@uam.es/maxence.urbani@imdea.org

DATOS DEL PROYECTO

Título: "Síntesis Dirigida de Porfirinas Expandidas para Aplicaciones en Electrónica Molecular y Nanomedicina"

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

En el corazón de esta iniciativa late la **nanociencia**, y la **síntesis orgánica avanzada** se erige como el eje formativo principal. Diseñaremos y obtendremos, a escala molecular, sistemas dador-aceptor de electrones basados en análogos porfirínicos expandidos para impulsar la próxima generación de células solares. Para ello, **sintetizaremos porfirinoides estratégicamente funcionalizados** (grupos hidroximetilo, carboxilo, halógeno, entre otros) que faciliten su anclaje a cromóforos de diversa naturaleza—fullerenos, ferroceno y más—construyendo nanoarquitecturas capaces de canalizar la energía con precisión.

Los procesos de **transferencia de energía y de carga** en estas diadas se investigarán en colaboración con la Universidad de Erlangen (Alemania), combinando espectroscopía ultrarrápida y modelización teórica para desentrañar la dinámica electrónica en la nanoescala.

En paralelo, **hemiporfiracinas metaladas** se depositarán sobre superficies metálicas y se inducirá su organización/polimerización supramolecular para formar **polímeros bidimensionales (2D)** con propiedades ópticas emergentes, abriendo la puerta a dispositivos optoelectrónicos de alto rendimiento.

Por último, se explorará el potencial de las hemiporfiracinas en **terapia fotodinámica del cáncer**, evaluando su capacidad para generar especies reactivas de oxígeno bajo irradiación.

Así, la propuesta ofrece un entorno único donde el dominio de la **síntesis orgánica** se convierte en la llave para abordar retos punteros de la nanociencia, desde la conversión de energía hasta la biomedicina.

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

Se busca un(a) estudiante altamente motivado(a), con una **sólida formación en química orgánica** y una marcada curiosidad por los **retos interdisciplinares de la nanociencia**. El perfil ideal combina rigurosidad académica, iniciativa en el laboratorio y una mente abierta para integrar conceptos de química, física y ciencia de materiales en un entorno de investigación innovador. Se valorará especialmente un **buen expediente académico** y una actitud proactiva hacia el aprendizaje experimental y colaborativo.

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

El Trabajo Fin de Máster (TFM) se enfocará inicialmente en la **síntesis y caracterización detallada de compuestos orgánicos funcionales**, sentando una base sólida en el laboratorio de química molecular. A partir de ahí, se explorarán sus **propiedades electrónicas y fotofísicas**, abriendo una ventana directa a los principios fundamentales de la nanociencia.

El/la estudiante adquirirá una formación rigurosa en **síntesis orgánica**, que será el núcleo del aprendizaje, y complementará esta experiencia con técnicas avanzadas de caracterización como **espectroscopía de fluorescencia, UV-Vis, espectrometría de masas (EM), resonancia magnética nuclear (RMN)** y **electroquímica**, entre otras.

El itinerario experimental será flexible: se diseñará en función del interés del/de la estudiante, seleccionando las técnicas y enfoques más afines a sus inquietudes y vocación científica. Esta propuesta brinda, por tanto, **una oportunidad integral para desarrollar habilidades clave en la investigación molecular**, combinando creatividad sintética y análisis funcional con una perspectiva aplicada en materiales avanzados.

PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2025-26

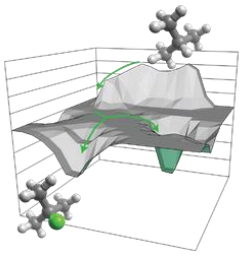
DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE

Apellidos y nombre del director(es) del proyecto: Alonso Montero, Inés y Rodríguez Garrido, Nuria	
Cargo: Profesor Titular y Profesor Titular	
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(sp^3)–H empleando catálisis de cobalto.

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



Actualmente, la **Química Teórica y la Modelización Computacional son herramientas esenciales para profundizar en** el conocimiento de numerosos procesos químicos. Un ejemplo destacado es su papel en **la racionalización de la reactividad y selectividad en la funcionalización directa de enlaces C–H mediante catálisis metálica**. Este conocimiento es clave para diseñar catalizadores más eficientes y aplicar estas estrategias en la síntesis de compuestos complejos con aplicaciones en sectores como el farmacéutico y el agroquímico.

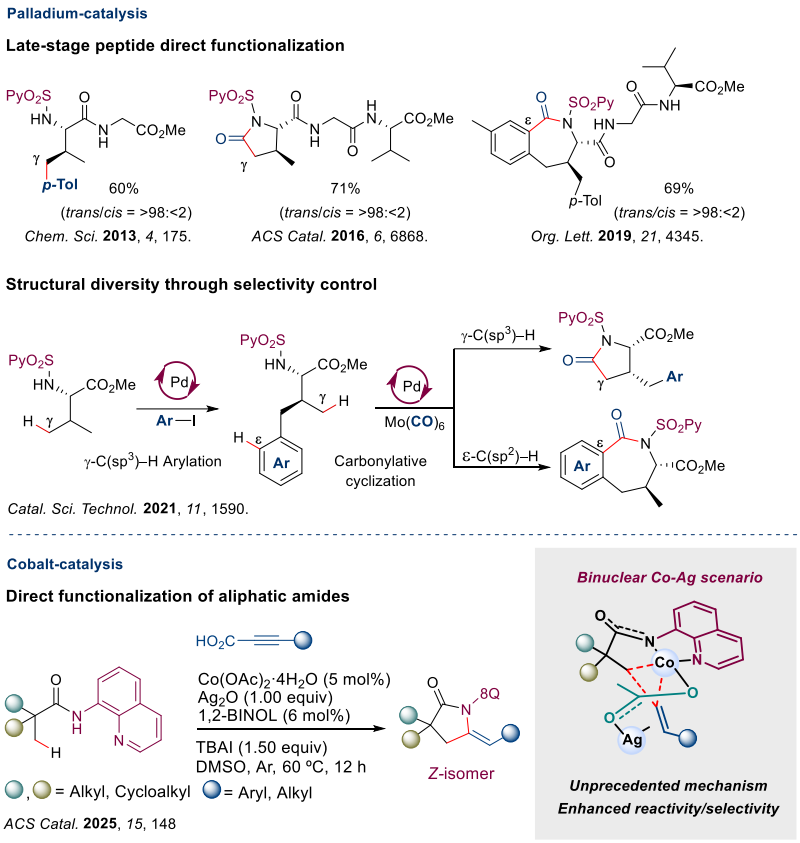
En este contexto, nuestro grupo ha sido pionero en desarrollar metodologías para la funcionalización directa y selectiva de aminoácidos, permitiendo el acceso rápido a bibliotecas de AAs no naturales. Estas estructuras son especialmente relevantes para el desarrollo de terapias peptídicas, que destacan por su mayor especificidad y menor toxicidad frente a fármacos convencionales.

El elemento común de estos procesos ha sido 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.

En el marco de esta línea de investigación, **el objetivo del presente proyecto es desarrollar rutas sintéticas basadas en catalizadores de metales de la primera serie de transición, como el Co(II), en sustitución del paladio, con miras a una mayor sostenibilidad.** Nuestro grupo ha contribuido significativamente en este campo, destacando el diseño de un sistema Ag/Co-catalítico para la funcionalización de enlaces β-C(sp^3)–H en amidas alifáticas. Estudios mecanísticos, tanto experimentales como teóricos, han revelado un mecanismo sin precedentes que involucra

especies bimetálicas Co–Ag, subrayando la originalidad y el alto potencial de esta metodología en la activación de enlaces C–H.

El alumno se especializará en la síntesis de compuestos orgánicos (aminoácidos y sus precursores), organometálicos y en el diseño de reacciones catalíticas. Paralelamente, se llevará a cabo el estudio teórico de estas transformaciones mediante cálculos DFT con el programa Gaussian. Los modelos obtenidos permitirán racionalizar los resultados experimentales, aportando información a nivel molecular sobre el mecanismo de reacción. Este enfoque facilitará el diseño de modificaciones que permitan mejorar la reactividad buscada, así como la interpretación de resultados experimentales anómalos, contribuyendo a la identificación de condiciones que conviertan esta nueva reactividad en una herramienta sintética versátil para diferentes tipos de compuestos.



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: 14 de julio de 2025 Firma de los directores del proyecto:

Inés Alonso Montero

Nuria Rodríguez Garrido

MASTERQO
MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGANICA
MENCIÓN DE MÁSTER EXCELENTE XUNTA DE GALICIA

UAM Universidad Autónoma de Madrid

UNIVERSIDAD COMPLUTENSE MADRID

USC UNIVERSIDADE DE SANTIAGO DE COMPOSTELA

XUNTA DE GALICIA

PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2025-2026

DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE

Apellidos y nombre del director(es) del proyecto: Javier Corpas Pardo & Ramón Gómez Arrayás	
Cargo: Investigador Ramón y Cajal/Catedrático de Universidad	
Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto: Química Orgánica (UAM) Universidad Autónoma de Madrid, Facultad de Ciencias, Departamento de Química Orgánica (módulo 01, laboratorio 408)	
Teléfono directo 91 497 2772	**e-mail** javier.corpas@uam.es / ramon.gomez@uam.es

DATOS DEL PROYECTO

Título: Hacia una aproximación biomimética en reacciones de transferencia de átomo de hidrógeno (HAT) mediante fotocatálisis

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

1. Área de conocimiento en que se enmarca:

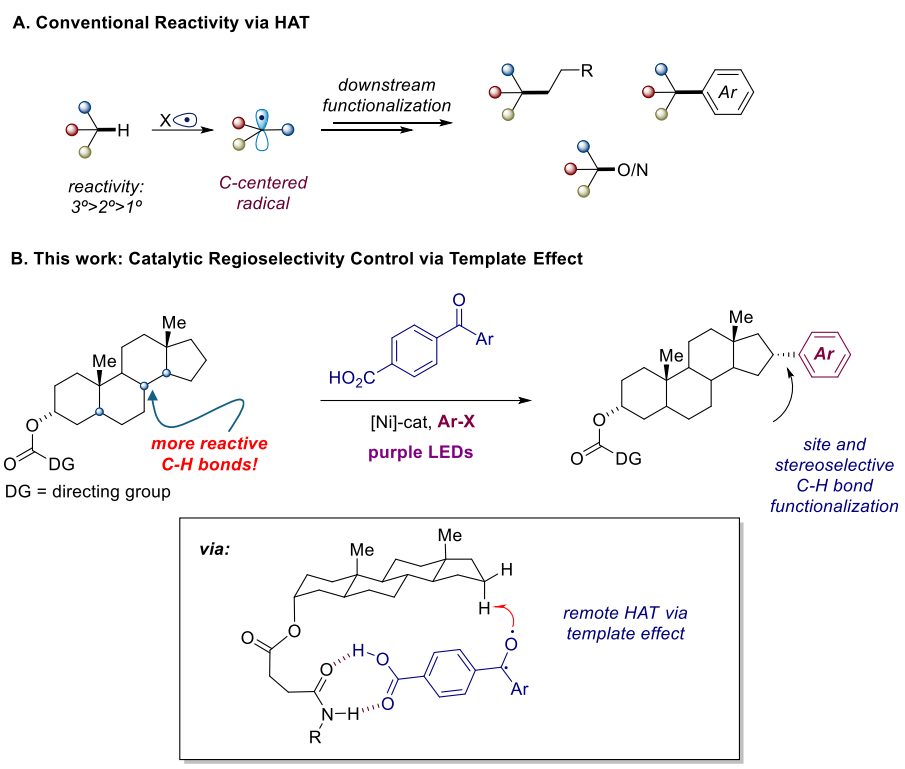
Dentro del área general de la Química Orgánica, el estudiante recibirá formación de carácter **multidisciplinar** adquirirá conocimientos en procedimientos experimentales en síntesis orgánica, fotoquímica y química organometálica. Estos incidirán en las técnicas de preparación, purificación y caracterización de sustratos generales obtenidas durante la carrera, que se ampliarán para incluir técnicas más avanzadas de espectroscopía. Asimismo, se iniciará al estudiante en técnicas más avanzadas propias de un laboratorio de fotocatálisis y química orgánica, 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

El objetivo del trabajo de investigación se enmarca en el **diseño biomimético de nuevos fotocatalizadores** para el control de la activación no convencional de enlaces C–H empleando estrategias **basadas en reacciones de transferencia de átomo de hidrógeno (HAT)**. En este contexto, el empleo de luz visible en presencia de especies radicalarias electrófilas es una estrategia bien establecida para la activación de enlaces C–H en moléculas orgánicas para la generación de radicales. No obstante, estos procesos están controlados por la naturaleza intrínseca del enlace C–H a activar, lo cual está gobernado por factores termodinámicos (energía de disociación de enlace) y polares, lo que limita el empleo de estas estrategias hacia la activación a voluntad de diferentes enlaces C–H de distinta naturaleza. [1]

El presente proyecto de TFM plantea desarrollar nuevos catalizadores HAT para el control a voluntad de la activación de enlaces C–H obviando la naturaleza intrínseca del mismo, empleando para ello estrategias de tipo *template* que permitan una **interacción productiva y reversible** entre el sustrato y el catalizador con el objetivo de activar posiciones no convencionales, tal y como lo haría una enzima (aproximación biomimética).[2] De este modo, se podrá llevar a cabo el desarrollo de nuevos procesos de

funcionalización remota de moléculas de elevada complejidad generando intermedios de tipo radicalario, los cuales se aprovecharán para la generación de nuevos enlaces C─C mediante reacciones de tipo Giese o metalafotoredox; así como el potencial desarrollo de nuevos enlaces C─heteroátomo (C─N o C─O).[3]



El estudiante explorará diferentes aproximaciones en este contexto, estudiando una amplia variabilidad de grupos funcionales con el objetivo de discernir el método de interacción más eficiente para controlar la regioquímica del proceso. Este hecho permitirá al estudiante evaluar los parámetros estructurales y de reactividad con mayor influencia, lo que le permitirá el desarrollo racional de una nueva familia de catalizadores con carácter de ***enzimas fotoactivas sintéticas***. Así mismo, se estudiarán diferentes *linkers* para evaluar la viabilidad de activar ortogonalmente otros enlaces C─H con el objetivo de desarrollar métodos regiodivergentes, así como la influencia de diferentes grupos electrónicos que permitan modular el proceso de HAT.

Referencias:

[1] L. Capaldo, D. Ravelli, M. Fagnoni. Direct Photocatalyzed Hydrogen Atom Transfer (HAT) for Aliphatic C–H Bonds Elaboration. *Chem. Rev.* **2022**, *122,* 1875–1924.

[2] (a) R. Breslow, Biomimetic Chemistry and Artificial Enzymes: Catalysis by Design. *Acc. Chem. Res.* **1995**, *28*, 146-153; (b) R. Breslow, Artificial Enzymes. *Science* **1982**, *218*, 532-537; (c) J. Ozawa, M. Tashiro, J. Ni, K. Oisaki, M. Kanai, Chemo- and regioselective oxygenation of C(sp3)–H bonds in aliphatic alcohols using a covalently bound directing activator and atmospheric oxygen. *Chem. Sci.,* **2016**, *7*, 1904–1909; (d) Y. Jiao, X.-Y. Chen, J. F. Stoddart, Weak bonding strategies for achieving regio- and site-selective transformations. *Chem* **2022**, *8*, 414–438

[3] Y. Shen, Y. Gu, R. Martin, sp^3 C−H Arylation and Alkylation Enabled by the Synergy of Triplet Excited Ketones and Nickel Catalysts. *J. Am. Chem. Soc.* **2018**, *140*, 12200−12209.

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).

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

Fecha: **14-07-2025**

Firma de los directores del proyecto:

Javier Corpas Pardo **Ramón Gómez Arrayás**

MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGÁNICA

PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2025-26

DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE

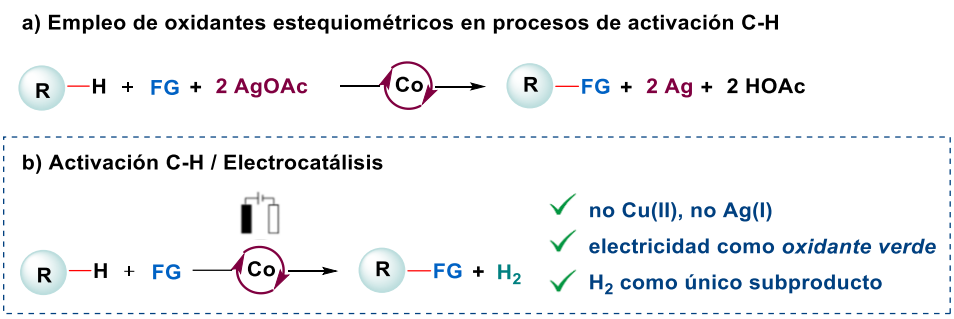
Apellidos y nombre del director(es) del proyecto: Marzo Puerta, Leyre; Rodríguez Garrido, Nuria	
Cargo: Contratado Ramón y Titular, respectivamente	
Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto: Departamento de Química Orgánica	
Teléfono directo: Leyre: 6394; Nuria: 2771	**e-mail:** leyre.marzo@uam.es ; n.rodriguez@uam.es

DATOS DEL PROYECTO

Título: Combinación de los avances en procesos en electroquímica y procesos de funcionalización C–H

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

En química, abordar la síntesis de moléculas complejas es un ejercicio de creatividad que demanda el diseño correcto de una retrosíntesis eficiente, empleando estrategias limpias (sostenibles), suaves y eficaces (económicas). Los nuevos procesos de síntesis que cumplan estos criterios son un trampolín para las innovaciones tanto en el ámbito de la química medicinal como en la ciencia de materiales.



En esta dirección, la funcionalización directa de enlaces C–H mediante catálisis metálica es una de las áreas más activas y dinámicas de la química orgánica actual ya que su empleo permite desconexiones sintéticas en el marco de la "química sostenible".[1] No obstante, la sostenibilidad de los procesos puede verse comprometida en ocasiones por el empleo de catalizadores basados en metales preciosos (Ru, Rh, Ir, Pd, etc) y cantidades estequiométricas de oxidantes de metales tóxicos (sales de plata, cobre, etc). Por ello, uno de los retos que actualmente se persigue es el desarrollo de métodos alternativos empleando la catálisis con metales de transición 3d, más baratos y menos tóxicos, y sustituyendo los oxidantes químicos por alternativas más sostenibles.[2] En este sentido, la electrooxidación destaca porque es una estrategia que permite un uso eficiente de las energías renovables de fuentes sostenibles para la formación de enlaces químicos.[3]

Así pues, el objetivo de este TFM es explorar la funcionalización directa y selectiva de enlaces C(sp^3)–H mediante catálisis de cobalto, utilizando las ventajas directas de la electrocatálisis. Principalmente, se abordarán procesos que permitan acceder a moléculas complejas con átomos de Csp^3 potencialmente estereogénicos.[4] Estos motivos estructurales son la clave de la estructura de algunos de los más destacados productos naturales, medicamentos,[5] sondas biológicas y materiales funcionales.[6]

Bibliografía:

[1] Crabtree, R. H.; Lei, A. *Chem. Rev.* **2017**, *117*, 8481.

[2] Desai, B.; Uppuluru, A.; Dey, A.; Deshpande, N:; Dholakiya, B. Z.; Sivaramakrishn, A.; Padala, T. K. *Org. Biomol. Chem.* **2023**, *21*, 673-699

[3] Meyer, T. H.; Finger, L. H.; Gandeepan, P.; Ackermann, L. *Trends in Chemistry*, *2019*, 1, 63.

[4] Mondal, S.; Dumur, F:; Gigmes, D.; Sibi, M. P.; Bertrand, M. P.; Nechab, M. *Chem. Rev.* **2022**, *122*, 5842.

[5] Lovering, F.; Bikker, J.; Humblet, C. *J. Med. Chem.* **2009**, *52*, 6752.

[6] Worch, J. C. *et al. Nat. Rev. Chem.* **2019**, *3*, 514.

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.

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), y técnicas cromatográficas (HPLC, GC) completan la formación del estudiante en todos los aspectos mencionados.

Fecha: 14 de julio de 2025

Firma de los directores del proyecto:

Leyre Marzo Puerta

Nuria Rodríguez Garrido

MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGÁNICA

PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2025-2026

DATOS DEL DIRECTOR(ES) DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE

Apellidos y nombre del director(es) del proyecto: Adrio Sevilla, F. Javier	
Cargo: Doctorando (FPI)/Catedrático	
Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto: Química Orgánica, Departamento de Química Orgánica, Universidad Autónoma de Madrid	
Teléfono directo Javier: 3874	**e-mail** javier.adrio@uam.es

DATOS DEL PROYECTO

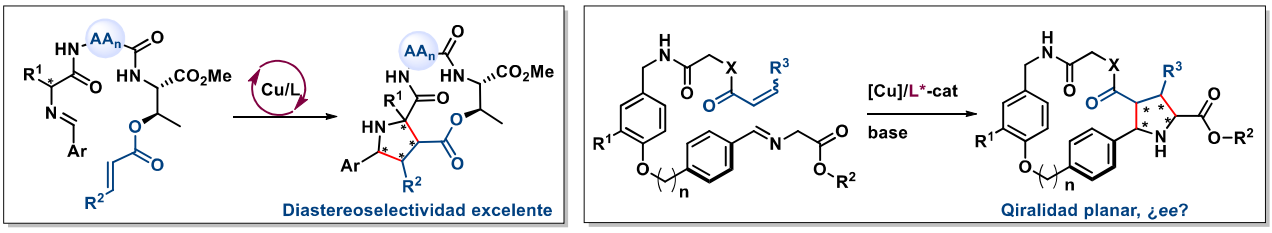
Título: *Cicloadición 1,3-dipolar como etapa clave para la obtención estereoselectiva de macrociclos quirales*

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

Las moléculas con estructura macrocíclica se definen como aquellas que contienen ciclos de al menos 12 átomos de carbono. Tanto los macrociclos de origen natural como los sintéticos poseen un extraordinario valor en Química Médica debido, no sólo a su actividad biológica, si no también por su utilidad como herramienta para entender los mecanismos de las interacciones claves para el desarrollo de nuevos fármacos; donde la quiralidad tiene un papel fundamental. Por lo tanto, el desarrollo de métodos enantioselectivos para la preparación de esta importante familia de compuestos es un reto de enorme interés dentro de la síntesis orgánica.

Una parte de la investigación de nuestro grupo en los últimos años se ha centrado en el estudio de las reacciones de cicloadición 1,3-dipolares entre iluros de azometino y olefinas activadas, método muy convergente para la preparación de pirrolidinas.[1] La versión asimétrica, utilizando complejos metálicos quirales como catalizadores, presenta un extraordinario potencial sintético ya que permite generar en una única etapa dos nuevos enlaces y hasta 4 centros estereogénicos contiguos, de forma controlada. Adicionalmente, la elevada tolerancia estructural tanto en el dipolo como en el dipolarófilo otorga a este proceso una gran versatilidad, por lo que es habitual encontrar en la bibliografía ejemplos de su aplicación en la síntesis total de moléculas complejas.

En este trabajo de fin de máster planteamos como objetivo general la utilización de la reacción de cicloadición 1,3-dipolar con iluros de azometino como etapa clave para la preparación de macrociclos con posibles aplicaciones biológicas. Resultados preliminares obtenidos en nuestro grupo de investigación demuestran la viabilidad de esta hipótesis de partida ya que se han encontrado condiciones de reacción tanto para llevar a cabo la cicloadición diasteroselectiva de péptidos lineales,[2] como para la ciclación enantioselectiva de macrociclos con quiralidad planar[3] (Esquema).



Bibliografía:

1. J. Adrio, J. C. Carretero, *Chem. Commun.* **2019**, *55*, 11979-11991; J. Adrio, J. C. Carretero, *Chem. Commun.* **2014**, *50*, 12434-12446.

2. E. Gallent; I. Alonso, J. C. Carretero, N. Rodriguez, J. Adrio, *Org. Lett.* **2024**, *26*, 10394-10398.

3. E. Gallent, *Doctoral Thesis in progress*, **2025**.

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 su naturaleza interdisciplinar, 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.

Fecha: 14 de julio de 2025

Firma de los directores del proyecto:

F. Javier Adrio Sevilla

MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGÁNICA

PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2025-2026

DATOS DEL DIRECTOR(ES) DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE

Apellidos y nombre del director(es) del proyecto:
Adrio Sevilla, F. Javier; Rodríguez Garrido, Nuria

Cargo:
Catedrático/Titular

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

Teléfono directo:	**e-mail**
Javier: 3874; Nuria: 2771	javier.adrio@uam.es; n.rodriguez@uam.es

DATOS DEL PROYECTO

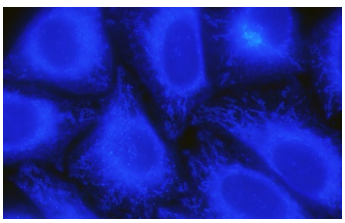
Título: Síntesis de conjugados ciclopétido-BODIPY para aplicaciones en bioimagen

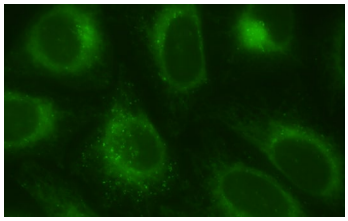
Breve descripción de los objetivos, contenido del proyecto y tareas a realizar

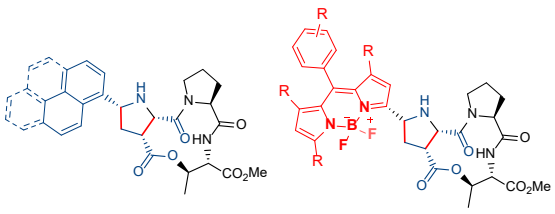
La conjugación de moléculas bioactivas con restos fluorescentes para aplicaciones en bioimagen como sondas fluorescentes es un campo de excepcional interés. Las sondas fluorescentes son moléculas que absorben luz de una longitud de onda y emiten luz a otra diferente (un proceso conocido como fluorescencia), y se utilizan para estudiar muestras biológicas.

Los péptidos, incluyendo los ciclopéptidos, poseen propiedades como agentes terapéuticos y su conjugación con moléculas fluorescentes es clave para el estudio de su mecanismo de acción. En este contexto, el desarrollo de metodologías eficientes para la conjugación o anclaje de moléculas fluorescentes a péptidos es un objetivo prioritario dentro de la química sintética.

Recientemente, en muestro grupo de investigación hemos desarrollado una metodología para la preparación de péptidos cíclicos utilizando como etapa clave la reacción de cicloadición 1,3-dipolar entre iluros de azometino y olefinas activadas. Entre los péptidos sintetizados destacan los conjugados con estructuras poliaromáticas fluorescentes (Figura). Los estudios de localización en células HeLa realizadas en colaboración con el Prof. Francisco Sanz Rodríguez del Dpto. de Biología (UAM) han permitido determinar que el ciclopeptido internaliza en célula y se localiza mayoritariamente en las mitocondrias.







Como objetivo de este Trabajo de Fin de Máster, se plantea el desarrollo de un nuevo método de bioconjugación de péptidos con moléculas fluorescentes, basado en la reacción de cicloadición 1,3-dipolar de iluros de azometino. Se prestará especial atención a la conjugación con colorantes de la familia BODIPY. Estos compuestos, derivados del 4,4-difluoro-4-bora-3a,4a-diaza-s-indaceno, presentan estructuras altamente modulables, lo que permite un ajuste fino de su estabilidad, solubilidad y propiedades espectroscópicas. Tales características los convierten en candidatos idóneos para diversas aplicaciones, entre ellas la bioimagen mediante fluorescencia.

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 su naturaleza interdisciplinar, 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.

Fco. Javier Adrio Sevilla

Nuria Rodríguez Garrido

MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGANICA
MENCIÓN DE MÁSTER EXCELENTE XUNTA DE GALICIA

PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2025-2026

DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE

Apellidos y nombre del director(es) del proyecto: Alba Collado Martinez y Kevin Gutierrez Contreras	
Cargo: Profesora Permanente Laboral y PDIF (CAM)	
Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto: **Departamento de Química Inorgánica**	
Teléfono directo **914975925**	**e-mail alba.collado@uam.es y kevin.gutierrez@uam.es**

DATOS DEL PROYECTO

Título: Aplicación de compuestos organometálicos como catalizadores en síntesis orgánica
Breve descripción de los objetivos, contenido del proyecto y tareas a realizar El área de la catálisis ha experimentado un gran desarrollo en las últimas décadas permitiendo la preparación de moléculas complejas de manera sencilla. Los compuestos basados en metales de transición han demostrado ser catalizadores muy versátiles para una gran cantidad de transformaciones. De hecho, la gran mayoría de los procesos industriales utilizan procesos catalíticos mediados por metales de transición en alguna etapa de la síntesis. Con el objetivo de desarrollar nuevos procesos catalíticos para la síntesis de moléculas de interés, resulta necesario estudiar la actividad de los compuestos basados en metales de transición y conocer las propiedades estereoelectrónicas que definen su capacidad catalítica. Así, como objetivo principal de este Trabajo de Fin de Máster se plantea la síntesis y caracterización de nuevos compuestos de coordinación y organometálicos y su aplicación como catalizadores en procesos de fotocatálisis y/o electrocatálisis. Se llevará a cabo la caracterización completa de los complejos mediante técnicas espectroscópicas (RMN, IR) y espectrométricas (EM) y mediante difracción de rayos X. La actividad catalítica de los mismos se evaluará en procesos de interés fundamentalmente dirigidos a la funcionalización de CO_2. El estudiante ampliará conocimientos de Química Orgánica, Química Organometálica y Catálisis Homogénea.
Capacidades y conocimientos recomendables que debe tener el estudiante para la realización de este proyecto El estudiante deberá tener experiencia en síntesis orgánica y organometálica, incluyendo el manejo de línea de Schlenk. Es recomendable que el estudiante tenga conocimientos de caracterización estructural de moléculas orgánicas e inorgánicas Se recomienda un buen nivel de inglés
Indíquese cualquier otra aclaración que se considere que pueda ayudar a los estudiantes en la elección del TFM

MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGANICA
MENCIÓN DE MÁSTER EXCELENTE XUNTA DE GALICIA

PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2025-2026

DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE

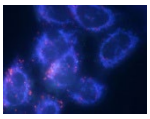
Apellidos y nombre del director(es) del proyecto: Maria Ribagorda Lobera	
Cargo: Profesora Titular	
Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto: Química Orgánica Dpto Química Orgánica, Universidad Autónoma de Madrid, Facultad de Ciencias, Departamento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

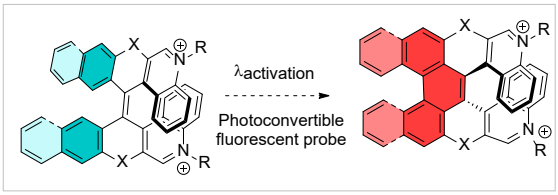
DATOS DEL PROYECTO

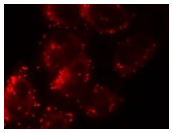
Título: Preparación de sensores fotoactivables basados en diazaxantilidenos.

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

El objetivo general de este proyecto de fin de Máster es preparar sondas fluorescentes basadas en 1,1'-diazaxantilidenos (DXT). Los DXT se han descrito recientemente como sondas fotoconvertibles de lisosomas para monitorizar células vivas. Además, dependiendo de la sustitución presente en el anillo heteroaromático, se ha demostrado que son capaces de atravesar la barrera hematoencefálica, convirtiéndolas en sensores ideales para el estudio, visualización y el monitoreo en tiempo real de procesos biológicos y patológicos dentro del cerebro, proporcionando información crucial sobre la dinámica celular y molecular en el sistema nervioso central, lo cual es esencial para tratar enfermedades neurodegenerativas, tumores cerebrales y trastornos neurológicos con mayor precisión y efectividad. El mecanismo de activación de los DXT se basa en una reacción de electrociclación/oxidación de 6π permitida fotoquímicamente, que permite tener una sonda fotoconvertible de tipo On/On que opera con distintas longitudes de onda de emisión. En este contexto, prevemos el diseño de sondas fotoconvertibles basados en benzo-xantilidenos que presentan una conjugación extendida, para conseguir un desplazamiento hacia el rojo de la sonda. El trabajo se desarrollará en colaboración con el grupo de investigación de D. Chenoweth de la Universidad de Pensilvania y en colaboración con el Prof. Francisco Sanz del Dpto. de Bología (UAM) donde se llevará a cabo el estudio de sus propiedades como sondas fluorescentes de células HeLa.







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, 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.

MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGANICA
MENCIÓN DE MÁSTER EXCELENTE XUNTA DE GALICIA

PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2025-2026

DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE

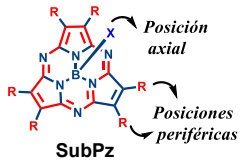
Apellidos y nombre del director(es) del proyecto: Rodríguez Morgade María Salomé y Gema Pérez de Bustos Canario	
Cargo: Catedrática e Investigadora Predoctoral	
Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto: Departamento de Química Orgánica, Universidad Autónoma de Madrid	
Teléfono directo **914973399**	**e-mail: salome.rodriguez@uam.es**

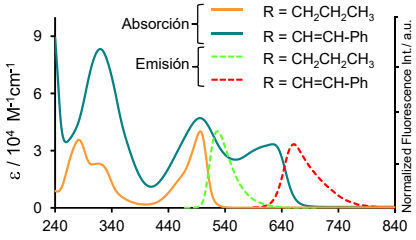
DATOS DEL PROYECTO

Título: Síntesis de materiales cromo-fluorogénicos basados en Subporfirazinas

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

Los sensores cromo-fluorogénicos son moléculas orgánicas diseñadas para reconocer analitos de manera selectiva y de convertir esta acción en señales medibles, como cambios de color (cromogénico) y/o la activación de propiedades fluorescentes (fluorogénico), al aplicar un cierto estímulo, como por ejemplo, cambios en el pH, potencial redox, polaridad, viscosidad, o en respuesta a interacciones bioquímicas específicas. Esta característica los convierte en herramientas inestimables en el campo de la bioquímica y la biología molecular, donde se utilizan combinados con microscopía confocal para monitorizar reacciones en tiempo real dentro de células y tejidos, permitiendo la visualización de procesos que antes eran invisibles con las técnicas convencionales. La aplicación de estos sustratos se extiende también a la ciencia de los materiales, donde contribuyen al desarrollo de nuevos materiales con propiedades avanzadas para detectar biomoléculas, aniones, cationes, gases tóxicos y otras sustancias peligrosas. Este proyecto se centra en la síntesis de Subporfirazinas y otros colorantes estructuralmente relacionados específicamente diseñados para actuar como sondas chromo-fluorogénicas de utilidad como agentes diagnósticos y terapéuticos. Las **subporfirazinas** (SubPz, Figura 1)[1] son porfirinoides sintéticos formados por tres anillos de pirrol unidos a través de las posiciones 2 y 5 mediante puentes aza. Estos heteroanulenos aromáticos que coordinan boro en su cavidad central tienen un circuito de 14 electrones π y estructura cónica.[2] Se trata de un tipo de moléculas muy versátil, cuyas propiedades fotofísicas, redox, químicas, fotoquímicas y supramoleculares se pueden modificar a medida para aplicaciones concretas mediante su manipulación estructural. Así, el cromóforo SubPz presenta una fuerte absorción a 500 nm y fluorescencia verde (Figura 2, líneas naranja y verde, respectivamente). Sin embargo, ambas propiedades se pueden modular drástica o finamente para una aplicación particular, mediante la sustitución del anillo de SubPz en las posiciones periféricas (Figura 1).[3]





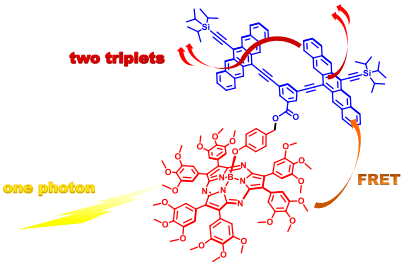


Fig. 1. Estructura de las SubPzs **Fig. 2**. Espectros de absorción y emisión de dos SubPzs **Fig. 3.** Generador de fisión de singlete

Por ejemplo, mediante la funcionalización con ciertos sustituyentes conjugados (Figura 2, líneas azul y roja) se puede desplazar la absorción y emisión del cromóforo a las ***regiones de diagnóstico y fototerapéutica*** (λ= 600-850 nm),[3] que es el rango espectral

de luz visible y NIR caracterizado por su alta penetración en tejidos humanos.[4] Las SubPzs además son fotosensibilizadores oxígeno singlete, presentando altos rendimientos cuánticos (Φ_Δ = 0.5–0.7).[5] El oxígeno singlete constituye una especie de oxígeno reactiva utilizada en la ***terapia fotodinámica del cáncer (PDT)*** y la ***fotoinactivación de microbios (PDI)***.[4,6]

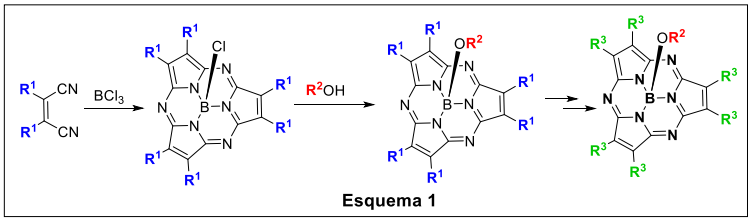
Las propiedades fotofísicas de las SubPzs también pueden alterarse mediante ***estímulos externos***. En este sentido, cabe destacar el desarrollo reciente de cromóforos cuya ***absorción en el infrarrojo cercano*** (740-900 nm), fluorescencia y generación de oxígeno singlete se activan mediante estimulación lumínica, utilizando luces monocromáticas con longitudes de onda en el visible y/o infrarrojo cercano, de alta penetración y benignas para los tejidos.[7] En otro trabajo se han utilizado las propiedades solvatocrómicas de una SubPz (variación de su fluorescencia en función de la polaridad del medio) para la optimización del fenómeno de fisión de singlete, en un dispositivo diseñado para su aplicación en tecnologías solares (Fig. 3).[8]

Objetivos del proyecto

El objetivo principal de este proyecto es el diseño y preparación de cromóforos y fluorocromos derivados de Subporfirazina que tengan propiedades fotofísicas y fotoquímicas activables mediante estímulos externos tales como el pH, el potencial redox, la polaridad o la viscosidad del entorno, ***con un enfoque para su aplicación en fotofarmacología.*** Se prepararán SubPzs sustituidas en la periferia (sustituyentes **R^1** / **R^3** en el Esquema 1) con grupos de reconocimiento capaces de experimentar una transformación química específica en un entorno concreto (por ejemplo, el pH, o el potencial redox de ciertos tipos de células, o alguno de sus orgánulos), que active una respuesta cromo- y fluorogénica definida en el anillo de SubPz. Adicionalmente, la posición axial se dotará de sustituyentes **R^2** que confieran propiedades físicas como anfifilia, o con grupos directores para una localización subcelular definida.[9] En etapas posteriores, se estudiará la utilidad de estos fluorocromos para la imagen de fluorescencia de células concretas, la membrana celular u orgánulos particulares.

Metodología y Plan de trabajo

1. Las subporfirazinas se prepararán mediante reacciones de ciclotrimerización asistida por boro de los correspondientes derivados dinitrilo (Esquema 1).[1] Los sustituyentes periféricos seleccionados se introducirán en una etapa temprana, en el precursor maleonitrilo (de tipo **R^1**), o posteriormente, siguiendo la metodología desarrollada utilizando reacciones de acoplamiento catalizadas por paladio (de tipo **R^3**).[3] La funcionalización en la posición axial se llevará a cabo mediante tratamiento de los correspondientes cloroderivados representados en el Esquema 1 con alcoholes,[5] o posteriormente, mediante química click.



Esquema 1

2. Se estudiarán las propiedades de absorción, emisión y redox, así como las propiedades activables (absorción, emisión y generación de oxígeno singlete) mediante estímulos externos, en función de la funcionalización **R^1** / **R^3** seleccionada.

3. Se estudiarán otras propiedades de interés farmacológico como la lipofilia y la organización supramolecular.

Referencias

1. M. S. Rodríguez-Morgade, S. Esperanza, T. Torres, and J. Barberá, *Chem. Eur. J.,* **2005**, *11*, 354.
2. C. G. Claessens, D. González-Rodríguez, M. S. Rodríguez-Morgade, A. Medina, and T. Torres, *Chem. Rev.,* **2014**, *114,* 2192.
3. E. Caballero, D. Guzmán, T. Torres, M. S. Rodríguez-Morgade, *J. Org. Chem.* **2020**, *85*, 1948.
4. J. M. Dabrowski, B. Pucelik, A. Regiel-Futyra, M. Brindell, O. Mazuryk, A. Kyzioł, G. Stochel,W. Macyk, L. G. Arnaut, *Coord. Chem. Rev.* **2016**, *325*, 67.
5. S. Ben Ahmed, G. Pérez de Bustos, J. Pina, T. Torres, M. S. Rodríguez-Morgade, *ChemPlusChem* **2024**, *89*, e202300779.
6. E. J. G. J. Dolmans, D. Fukumura and R. K. Jain, *Nat Rev Cancer*, **2003**, *3*, 380.
7. E. Cañizares-Espada, G. Pérez de Bustos, K. Naoda, A. Osuka, T. Torres, M. S. Rodríguez-Morgade, *Org. Lett.* **2024**, *26*, 955.
8. D. Guzmán, I. Papadopoulos, G. Lavarda, P. R. Rami, R. R. Tykwinski, M. S. Rodríguez-Morgade, D. M. Guldi, T. Torres, *Angew. Chem. Internat. Ed.* **2021**, *60*, 1474.
9. X. Li, Y. Liu, X. Li, W. Shi, H. Ma, Biosens. Bioelectron. **2022**, *200*, 113929.

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

El trabajo se puede realizar con los conocimientos estándar del Máster en Química Orgánica: Síntesis orgánica clásica y caracterización química.

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

El TFM se centrará en la síntesis y caracterización de compuestos metalorgánicos y el estudio de sus propiedades de absorción, luminiscentes, redox, etc. Para aquellos compuestos diseñados como sondas cromo-fluorogénicas se estudiará el proceso de activación y desactivación del color y la fluorescencia concretas utilizando estímulos externos. La idea es estudiar posteriormente las aplicaciones biológicas de los fluorocromos preparados. Con este trabajo el/la solicitante podrá reforzar los conocimientos de química orgánica, química supramolecular y ciencia de materiales alcanzados en las asignaturas del Máster, además de adquirir otros nuevos. Para la caracterización de los compuestos se utilizarán las técnicas habituales de síntesis orgánica como resonancia magnética nuclear y espectrometría de masas, y además, otras más específicas como la electroquímica, la espectrometría de absorción y emisión, la generación de oxígeno singlete, o la evaluación de la lipofilia.

MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGANICA
MENCIÓN DE MÁSTER EXCELENTE XUNTA DE GALICIA

PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2025-2026

DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE

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

DATOS DEL PROYECTO

Título: Síntesis de fotosensibilizadores y fluorocromos activables basados en Subporfirazinas y compuestos referibles

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

El objetivo de este proyecto es el desarrollo de la química y las propiedades supramoleculares de las subporfirazinas y sistemas referibles para el diseño, síntesis y estudio de materiales con propiedades no convencionales.

Las **subporfirazinas** (SubPz, Fig. 1)[1] son porfirinoides sintéticos formados por tres anillos de pirrol unidos a través de las posiciones 2 y 5 mediante puentes aza. Estos heteroanulenos aromáticos que coordinan boro en su cavidad central tienen un circuito de 14 electrones π y estructura cónica.[2] Se trata de un tipo de moléculas muy versátil, cuyas propiedades fotofísicas, redox, químicas, fotoquímicas y supramoleculares se pueden modificar a medida para aplicaciones concretas mediante su manipulación estructural. Así, el cromóforo SubPz presenta una fuerte absorción a 500 nm y fluorescencia verde (Fig. 2, líneas naranja y verde, respectivamente). Sin embargo, ambas propiedades se pueden modular drástica o finamente para una aplicación particular, mediante la sustitución del anillo de SubPz en las posiciones periféricas (Fig. 1).[3]Así, mediante la funcionalización con ciertos sustituyentes conjugados (Fig. 2, líneas azul y roja) se puede desplazar la absorción y emisión del cromóforo a las ***regiones de diagnóstico y fototerapéutica*** (λ= 600-850 nm),[3] que es el rango espectral de luz visible y NIR caracterizado por su alta penetración en tejidos humanos.[4] Las SubPzs además son fotosensibilizadores oxígeno singlete, presentando altos rendimientos cuánticos (Φ_Δ = 0.5−0.7).[5] El oxígeno singlete constituye una especie de oxígeno reactiva utilizada en la ***terapia fotodinámica del cáncer (PDT)***[4] y la ***fotoinactivación de microbios multirresistentes (PDI)***.[6]

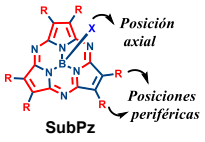


Fig. 1. Estructura de las SubPzs

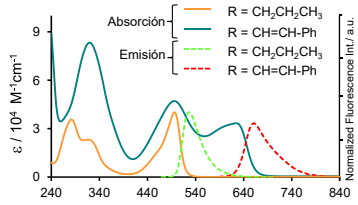


Fig. 2. Espectros de UV-Vis de dos SubPzs

Las SubPzs contienen en uno de los pirroles de su estructura un ***doble enlace cuasi-aislado*** (Fig. 1, doble enlace azul), susceptible de ser manipulado químicamente para generar propiedades excepcionales como el ***fotocromismo***. El sistema de la Fig. 3 contiene una unidad de ditienileteno (DTE) fusionado a la estructura de la SubPz, de manera que existe en dos estados fotoconvertibles, abierto y cerrado (A y C), a través de reacciones electrocíclicas involucrando este doble enlace. Debido al fuerte impacto de los sustituyentes periféricos en las propiedades de las SubPzs, se obtienen interruptores fotocrómicos sin precedente, cuya ***absorción en el infrarrojo cercano*** (740-900 nm), fluorescencia y generación de oxígeno singlete se activan mediante estimulación lumínica, utilizando luces con longitudes de onda en el visible y/o infrarrojo cercano, de alta penetración y benignas para los

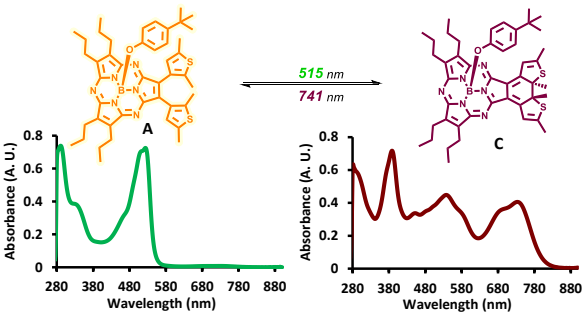


Fig. 3. Activación reversible de la absorción NIR de una SubPz

tejidos,[7] algo muy buscado para aplicaciones biomédicas, donde las fototerapias innovadoras que responden a longitudes de onda en la ventana óptica de los tejidos humanos (600–900 nm), presentan un gran potencial.[8] A modo de ejemplo, los fotones de > 800 nm penetran en el cerebro a través del cráneo hasta una profundidad de 3 cm. Sin embargo, hasta ahora la mayoría de los compuestos fotoactivables absorben fotones de longitudes de onda cortas (300–450 nm), limitando así su activación sólo a unos pocos milímetros de profundidad en un tejido.

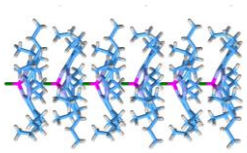


Fig. 4. Organización columnar de las SubPzs

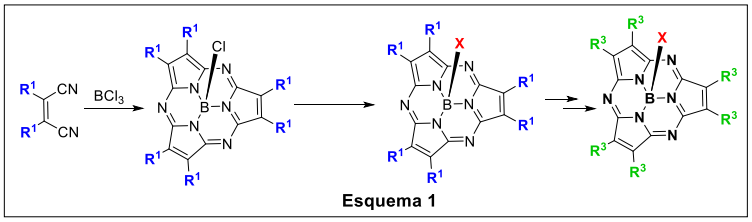
Además de su funcionalización, la organización supramolecular de las SubPzs en estructuras bien ordenadas, tanto en el estado cristalino como en mesofases, constituye una estrategia efectiva para generar materiales con propiedades mejoradas, en relación con las moléculas aisladas respectivas. Las SubPzs se asocian a través de interacciones π-π que se pueden reforzar mediante sustitución axial con flúor, dando lugar a fuertes interacciones dipolo-dipolo debido a la presencia del enlace B–F.[9] De hecho, estudios recientes confirman la capacidad de ciertos derivados para organizarse en fases de cristal líquido caracterizadas una transición a una mesofase columnar a 25 ºC.

Objetivos del proyecto

El objetivo principal de este proyecto es el diseño y preparación de derivados de Subporfirazina y/o sistemas referibles que tengan propiedades fotofísicas y fotoquímicas no convencionales, por ejemplo, comportamiento activable con luz biológicamente benigna, o la capacidad para autoensamblarse en fases condensadas, donde se esperan cambios en la curvatura de las moléculas individuales, así como en la libertad conformacional de los sustituyentes periféricos, capaces de producir un impacto notable en las propiedades fotofísicas de los compuestos. Se prepararán SubPzs sustituidas en la periferia con sustituyentes de tipo **R¹** o **R³** para conferirles propiedades de reactividad química concretas que permitan el desarrollo de nuevos interruptores moleculares, y/o para su organización supramolecular específica en fases condensadas que proporcionen alguna propiedad mejorada. La posición axial se dotará de sustituyentes **X** que confieran la solubilidad, localización o la organización supramolecular deseados.

Metodología y Plan de trabajo

1. Las subporfirazinas se prepararán mediante reacciones de ciclotrimerización asistida por boro de los correspondientes derivados dinitrilo (Esquema 1).[1] Los sustituyentes periféricos seleccionados se introducirán en una etapa temprana, en el precursor maleonitrilo (de tipo **R¹**), o posteriormente, siguiendo la metodología desarrollada utilizando reacciones de acoplamiento catalizadas por paladio (de tipo **R³**),[3] o desarrollando otras metodologías nuevas. La funcionalización en la posición axial se llevará a cabo utilizando la metodología desarrollada previamente,[5,9] o mediante química click.



Esquema 1

2. Se estudiarán las propiedades de absorción, emisión y redox de los sistemas preparados, así como las propiedades activables (absorción, emisión y generación de oxígeno singlete) mediante luz, o mediante su organización supramolecular, en función de la funcionalización **R¹** / **R³** seleccionada.

Referencias

1. M. S. Rodríguez-Morgade, S. Esperanza, T. Torres, and J. Barberá, *Chem. Eur. J.,* **2005**, *11*, 354.
2. C. G. Claessens, D. González-Rodríguez, M. S. Rodríguez-Morgade, A. Medina, and T. Torres, *Chem. Rev.,* **2014**, *114,* 2192.
3. E. Caballero, D. Guzmán, T. Torres, M. S. Rodríguez-Morgade, *J. Org. Chem.* **2020**, *85*, 1948.
4. J. M. Dabrowski, B. Pucelik, A. Regiel-Futyra, M. Brindell, O. Mazuryk, A. Kyzioł, G. Stochel,W. Macyk, L. G. Arnaut, *Coord. Chem. Rev.* **2016**, *325*, 67.
5. S. Ben Ahmed, G. Pérez de Bustos, J. Pina, T. Torres, M. S. Rodríguez-Morgade, *ChemPlusChem* **2024**, *89*, e202300779.
6. A. B. Domínguez, D. Ziental, J. Dlugaszewska, L. Sobotta, T. Torres, M. S. Rodríguez-Morgade, *Eur. J. Med. Chem* **2025**, *285*, 117214.
7. E. Cañizares-Espada, G. Pérez de Bustos, K. Naoda, A. Osuka, T. Torres, M. S. Rodríguez-Morgade, *Org. Lett.* **2024**, *26*, 955.
8. B. M. Vickerman, E. M. Zywot, T. K. Tarrant, D. S. Lawrence, *Nat. Rev. Chem.* **2021**, *5*, 816.
9. M. S. Rodríguez-Morgade, C. G. Claessens, A. Medina, D. González -Rodríguez, E. Gutiérrez-Puebla, A. Monge, I. Alkorta, J. Elguero, T. Torres, *Chem. Eur. J.* **2008**, *14*, 1342.

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

El trabajo se puede realizar con los conocimientos estándar del Máster en Química Orgánica: Síntesis orgánica clásica y caracterización química.

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

El trabajo se encuadra dentro de un proyecto en marcha que explota las propiedades diferenciales de las SubPzs para la generación de materiales con propiedades difíciles de obtener utilizando otras moléculas. El TFM se centrará en la síntesis y caracterización de compuestos metalorgánicos y el estudio de sus propiedades de absorción, luminiscentes, redox, etc. Según el diseño final, se estudiará el comportamiento fotocrómico de los compuestos utilizando luces LED monocromáticas, o las propiedades derivadas de su organización supramolecular. Con este trabajo el/la solicitante podrá reforzar los conocimientos de química orgánica, química supramolecular y ciencia de materiales alcanzados en las asignaturas del Máster, además de adquirir otros nuevos. Para la caracterización de los compuestos se utilizarán las técnicas habituales de síntesis orgánica como resonancia magnética nuclear y espectrometría de masas, y además, otras más específicas como la electroquímica, la espectrometría de absorción y emisión o la generación de oxígeno singlete.

MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGANICA
MENCIÓN DE MÁSTER EXCELENTE XUNTA DE GALICIA

PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2025-2026

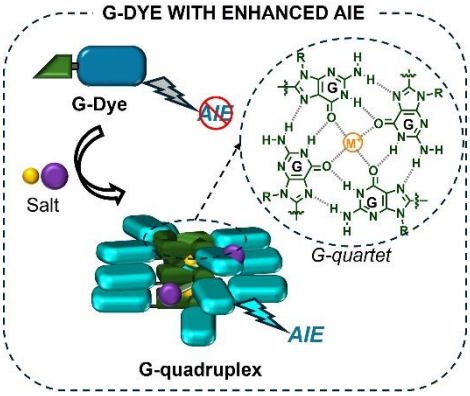
DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE

Apellidos y nombre del director(es) del proyecto: Valera González, Jorge Santos y Rodríguez Durán, Jorge	
Cargo: Investigador Postdoctoral, Investigador Predoctoral	
Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto: Departamento de Química Orgánica, Universidad Autónoma de Madrid Facultad de Ciencias, C/Francisco Tomás y Valiente 7 – Módulo 11, Lab 602.	
Teléfono directo 914973778	**e-mail** jorge.valera@uam.es

DATOS DEL PROYECTO

Título: Autoensamblaje de sistemas π-conjugados en unidades supramoleculares discretas

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



El autoensamblaje molecular es un proceso en el que las moléculas se organizan espontáneamente mediante interacciones no covalentes, como los enlaces de hidrógeno, el apilamiento π-π y las fuerzas electrostáticas, entre otras. A diferencia de la síntesis covalente tradicional, que implica la formación de enlaces químicos entre átomos, el autoensamblaje supramolecular se basa en interacciones débiles y reversibles, lo que permite la formación de estructuras intrincadas y dinámicas con gran precisión y adaptabilidad. En la ciencia de los materiales y la nanotecnología, el autoensamblaje supramolecular se aprovecha para crear materiales funcionales avanzados y nanoestructuras con aplicaciones en la administración de fármacos, la catálisis y la electrónica. En este último campo, la incorporación de sistemas π-conjugados resulta indispensable para obtener materiales con propiedades optoelectrónicas mejoradas respecto aquellas del monómero discreto.

El objetivo del presente proyecto se enmarca en una línea del grupo basada en la obtención de entidades supramoleculares discretas y quirales con propiedades optoelectrónicas mejoradas, basados en la combinación de distintos sistemas π-conjugados con derivados de guanosina (G). Estas moléculas son capaces de formar unidades supramoleculares robustas denominadas G-quadruplexes en presencia de K^+ o Na^+. En concreto, se pretende explorar una serie de derivados de G con unidades π-conjugadas de interés ("dyes", como BODIPYs, tetrafeniletenos y estilbenos) que permitan modular la formación de G-quadruplexes. Se espera que estas moléculas den al agregar fenómenos de emisión mejorada por agregación (AIE, por sus siglas en inglés) y fenómenos de emisión de luz circularmente polarizada (CPL). El alumno se encargará en primera instancia de la síntesis orgánica de una familia de derivados de guanosina π-funcionalizados. En segundo lugar, se estudiará el proceso de formación de la entidad supramolecular mediante técnicas espectroscópicas como RMN, UV Vis y CD. Finalmente, estas unidades se estudiarán en colaboración con distintos grupos de investigación para ver los fenómenos fotofísicos deseados.

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 debería tener interés por temas de Ingeniería Molecular y por la aportación de la Química Orgánica a otras áreas de la Ciencia: Química Supramolecular, Materiales Avanzados, etc. 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, tanto del grado en Química como del Máster en Química Orgánica.

MASTERQO
MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGANICA
MENCIÓN DE MÁSTER EXCELENTE XUNTA DE GALICIA

UAM Universidad Autónoma de Madrid

UNIVERSIDAD COMPLUTENSE MADRID

USC UNIVERSIDADE DE SANTIAGO DE COMPOSTELA

XUNTA DE GALICIA

PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2025-2026

DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE

Apellidos y nombre del director(es) del proyecto: Javier Corpas Pardo & Pablo Mauleón Pérez	
Cargo: Investigador Ramón y Cajal/Titular de Universidad	
Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto: Química Orgánica (UAM) Universidad Autónoma de Madrid, Facultad de Ciencias, Departamento de Química Orgánica (módulo 01, laboratorio 408)	
Teléfono directo 91 497 2208	**e-mail** javier.corpas@uam.es / pablo.mauleon@uam.es

DATOS DEL PROYECTO

Título: Nuevas reacciones catalíticas de formación de enlaces C-C mediante desoxigenación promovida por transferencia de átomo de hidrógeno (HAT)

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, fotoquímica 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. Asimismo, se iniciará al estudiante en técnicas más avanzadas propias de un laboratorio de fotocatálisis y química orgánica, 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.

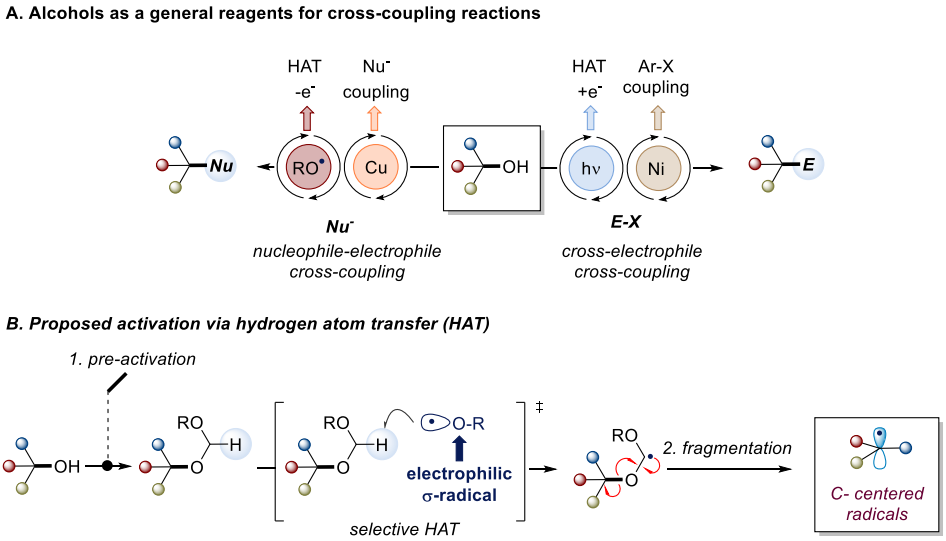
2. Objetivos

Las reacciones de acoplamiento cruzado (o *cross-coupling* en inglés) constituyen una herramienta fundamental en el desarrollo moderno de la química orgánica sintética. A día de hoy estos procesos están mayoritariamente gobernados por el empleo de sustratos electrófilos altamente reactivos, tales como haluros o triflatos. Con el objetivo de desarrollar nuevas estrategias retrosintéticas, sería muy interesante extrapolar este concepto a la activación selectiva de enlaces más inertes y que estén presentes en grupos funcionales convencionales, pero que a la vez permitan su fácil activación. En este contexto, el empleo de alcoholes — grupos portadores de un enlace C—O susceptible de ser activado — permitiría el uso de un grupo funcional muy empleado en química orgánica en reacciones de formación de enlaces C—C y C—heteroátomo. [1]

El objetivo del trabajo de investigación se enmarca en el desarrollo de **nuevos procesos para el empleo de alcoholes como reactivos de acoplamiento** en reacciones de formación de enlaces C—C y C—X. La estrategia empleada se basará en el estudio de nuevos reactivos para la activación homolítica del enlace C—O empleando como etapa clave reacciones de transferencia de átomo de hidrógeno (HAT).[2] En este contexto, el empleo de alcoholes convenientemente pre-funcionalizados en reacciones de *cross-*

coupling ha sido estudiado en otros contextos; no obstante, la mayoría de procesos descritos hasta el momento se basan en el empleo de estrategias redox, limitando este tipo de aproximaciones al empleo de electrófilos orgánicos.[3]

El presente proyecto de TFM plantea desarrollar una aproximación que permita el **empleo de especies electrófilas o nucleófilas a voluntad**. El estudiante explorará diferentes aproximaciones HAT con el objetivo de generar el correspondiente radical en posición α al átomo de oxígeno. Posteriormente se propone que la ruptura homolítica del enlace C─O genere el radical centrado en carbono necesario para llevar a cabo la correspondiente etapa de funcionalización.



El estudiante explorará diferentes procesos de formación de radicales electrófilos centrados en oxígeno, ya sea mediante ***activación fotocatalítica de cetonas en estado triplete***, que permitiría el empleo de reactivos electrófilos mediante el uso de catalizadores de níquel; o bien la ***activación térmica de peróxidos en presencia de catalizadores de cobre*** para el empleo de especies nucleófilas en reacciones de cross-coupling.[4]

Referencias:

[1] M. Oestreich et. al. "Metal-Catalyzed Cross-Coupling Reactions and More". Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA. DOI: 10.1002/9783527655588.

[2] (a) K. Hayday, R. D. McKelvey. "An anomeric effect in photochemical hydrogen abstraction reactions of tetrahydropyranyl ethers". *J. Org. Chem.* **1976**, *41*, 2222–2223; (b) C. M. Rynard, C. Thankachan, T. T. Tidwell. "Cyclization by Radical Displacement on Ester Groups. Conversion of Acetals to Lactones by Radical Abstraction with Stereoelectronic Control of Bond Scission". *J. Am. Chem. Soc.* **1979**, *101*, 1196–1201; (c) L. Capaldo, D. Ravelli, M. Fagnoni. "Direct Photocatalyzed Hydrogen Atom Transfer (HAT) for Aliphatic C–H Bonds Elaboration". *Chem. Rev.* **2022**, *122*, 1875–1924.

[3] R. Chen, N. E. Intermaggio, J. Xie, J. A. Rossi-Ashton, C. A. Gould, R. T. Martin, J. Alcázar, D. W. C. MacMillan. *Science* **2024**, *383*, 1350–1357.

[4] Z. Zhang, M. J. Tilby, D. Leonori. "Boryl Radical-mediated Halogen-Atom Transfer Enables Arylation of Alkyl Halides with Electrophilic and Nucleophilic Coupling Partners". *Nat. Synth.* **2024**, *3,* 1221–1230.

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).

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

Fecha: **17-07-2025**

Firma de los directores del proyecto:

Javier Corpas Pardo **Pablo Mauleón Pérez**

MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGÁNICA

PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL 2025-26 (TFM)

DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE

Apellidos y nombre del director(es) del proyecto: Pablo Mauleón Pérez / Guillermo Marcos Ayuso	
Cargo: Profesor Titular / Investigador Posdoctoral AITENEA	
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 2208	**e-mail:** pablo.mauleon@uam.es / guillermo.marcos@aitenea.es

DATOS DEL PROYECTO

Título: Desarrollo de procesos catalíticos guiados por inteligencia artificial

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. Asimismo, 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. Finalmente, el estudiante recibirá formación básica en química computacional e inteligencia artificial en el ámbito de la química predictiva y de optimización. 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

El objetivo del trabajo se enmarca en una línea de investigación del grupo dirigida al diseño de estrategias catalíticas innovadoras basadas en metales de transición que permitan la realización de procesos de acoplamiento en una sola operación sintética guiada por inteligencia artificial en moléculas de alto valor añadido.

El presente proyecto de TFM plantea desarrollar un sistema catalítico donde la inteligencia artificial tenga un papel fundamental, bien en la predicción de propiedades (regioselectividad, rendimiento…) o bien en el empleo de optimizaciones bayesianas para mejorar el proceso de optimización de la reacción. [1] Tradicionalmente, nuestro grupo de investigación ha estudiado estrategias que permite la funcionalización de alquinos regiocontrolada, empleando mecanismos con un metal y un solo ligando o en tándem usando un solo metal en combinación con dos ligandos (ML_1/L_2), cada uno con un papel específico para inducir la reactividad deseada al metal.[2] En este campo, la IA es capaz de predecir con excelentes resultados, las regioselectividades esperadas experimentalmente en estos procesos, proporcionando una potente herramienta de ayuda sintética.

Por otro lado, el empleo de modelos generativos capaces de estimar estructuras con ciertas propiedades de interés está resultado ser de gran interés en el descubrimiento de nuevos fármacos o materiales. En este campo, otras ramas de la inteligencia artificial como las optimizaciones bayesianas resultan muy útiles, debido a que son capaces de obtener la mejor combinación entre reactivos, disolventes, temperaturas, bases, etc… en la síntesis de una determinada molécula, basándose en procesos guiados por inteligencia artificial.

Para continuar explorando este interesante proyecto, proponemos la extensión de esta química a otras reacciones de acoplamiento. El éxito en esta continuación permitiría el acceso a moléculas potencialmente prometedoras en diferentes campos como la química farmacéutica, o moléculas con un regio/estereocontrol definido y predicho por la inteligencia artificial.

Referencias:

[1] a) B. J. Shields, J. Stevens, J. Li, M. Parasram, F. Damani, J. I. M. Alvarado, J. M. Janey, R. P. Adams, A. G. Doyle. "Bayesian reaction optimization as a tool for chemical synthesis". *Nature* **2021**, *590*, 89–96.

[2] S.-H. Kim-Lee, P. Mauleón, R. Gómez Arrayás, J. C. Carretero. "Dynamic multiligand catalysis: A polar to radical crossover strategy expands alkyne carboboration to unactivated secondary alkyl halides". *Chem* **2021**, *7*, 2212-2226.

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).

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

Fecha: 18-07-2025

Firma de los directores del proyecto:

Pablo Mauleón Pérez **Guillermo Marcos Ayuso**

MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGANICA
MENCIÓN DE MÁSTER EXCELENTE XUNTA DE GALICIA

PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2025-2026

DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE

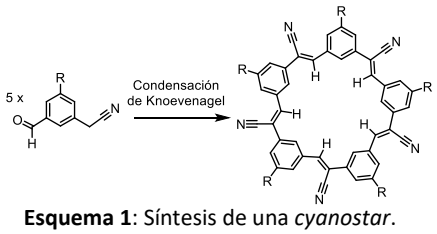
Apellidos y nombre del director(es) del proyecto: Bottari, Giovanni / Raccosta Bermúdez, Sara	
Cargo: Profesor Titular / Becaria FPI	
Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto: Departamento de Química Orgánica, Universidad Autónoma de Madrid, 28049, Madrid	
Teléfono directo 914972777	**e-mail** giovanni.bottari@uam.es

DATOS DEL PROYECTO

Título: Síntesis y estudio de cajas moleculares basadas en macrociclos de tipo "*cyanostar*"

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

Las "*cyanostars*", descritas por primera vez en 2013,[1] son una familia de compuestos macrocíclicos que se obtienen en alto rendimientos a través de una reacción de autocondensación de tipo Knoevenagel entre 5 moléculas funcionalizadas cada una con un grupo aldehído y un resto de metilenocarbonitrilo (Esquema 1).



Esquema 1: Síntesis de una *cyanostar*.

Estos macrociclos de estructura plana poseen interesantes propiedades fisicoquímicas entre las cuales cabe destacar su alta afinidad para la complejación en disolución de aniones monovalentes en su cavidad central debido a la presencia de 5 grupos ciano periféricos que aumentan considerablemente el carácter electrón-deficiente de dicha cavidad.[2] Para estos complejos *cyanostar*:anion, generalmente se observa una estequiometria de tipo 2:1 (Figura 1), si bien utilizando aniones de tipo fosfatos ($ROPO_3H^-$) o fosfonatos (RPO_3H^-) es posible obtener complejos supramoleculares de estequiometría 2:2 (Figura 2a).[3] Además, se ha demostrado que la utilización de aniones bidentados de tipo difosfatos/difosfonatos es capaz de promover la formación de copolímeros supramoleculares que, una vez procesados, presentan propiedades de adhesión comparables a las de pegamentos poliméricos covalentes (Figura 2b).[4]

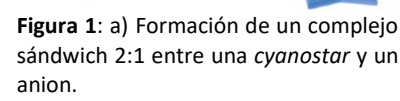


Figura 1: a) Formación de un complejo sándwich 2:1 entre una *cyanostar* y un anion.

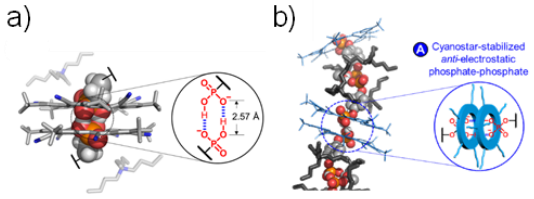


Figura 2: Estructura cristalina de a) complejo supramolecular 2:2 *cyanostar*:fenilfosfonato y b) copolímero supramolecular 1:1 *cyanostar*:fenilendifosfato.

Recientemente, nuestro grupo de investigación ha empezado una nueva linea de investigación centrada en la preparación y estudio de nuevos sistemas basados en *cyanostars* capaces, por ejemplo, de agregarse en disolución sin necesidad de complejar aniones, o de dar lugar a la formación de estados de separación de carga debido a la presencia, en sus estructuras, de unidades dadoras y aceptoras de electrones.

Con la idea de seguir expandiendo esta línea de investigación, en este TFM se pretende sintetizar *cyanostars* funcionalizadas en sus posiciones periféricas por grupos fenilos a su vez sustituidos en su posición *meta* por grupos amino o aldehido (Figure 3a). Estas *cyanostars* se acoplarán con diaminas (en el caso de la *cyanostars* funcionalizadas con grupos aldehídos, Figura 3c), o dialdehídos (en el caso de la *cyanostars* funcionalizadas con grupos aminas) para dar lugar a la formación de cajas moleculares de distinto tamaño a través de la formación de enlaces dinámicos de tipo imina. Se explorará también la posibilidad de formar cajas metalo-orgánicas utilizando *cyanostars* funcionalizadas en sus periférica por grupos piridilo capaces de coordinarse a iones metálicos tipo Pd^{2+} o Pt^{2+}.

Una vez obtenidas estas cajas moleculares, se pretende estudiar su capacidad complejar aniones y comparar estas propiedades con las de los sistemas monoméricos de *cyanostars*. En presencia de determinados aniones capaces de formar estructuras de tipo sándwich *cyanostars*:anión con estequiometría 2:1, y en función de las características estructurales del conector que une las dos *cyanostars*, se puede anticipar la formación de polímeros supramoleculares basados en estas cajas de *cyanostars*.

Los objetivos desglosados del proyecto son:

a) Síntesis en solución de *cyanostars* funcionalizadas en sus posiciones periféricas por grupos amino, aldehído o piridilo.
b) Fabricación de cajas moleculares basadas en *cyanostars* utilizando química combinatoria dinámica e interacciones metal-ligando.
c) Estudio de la capacidad de complejación de aniones de las cajas moleculares preparadas.

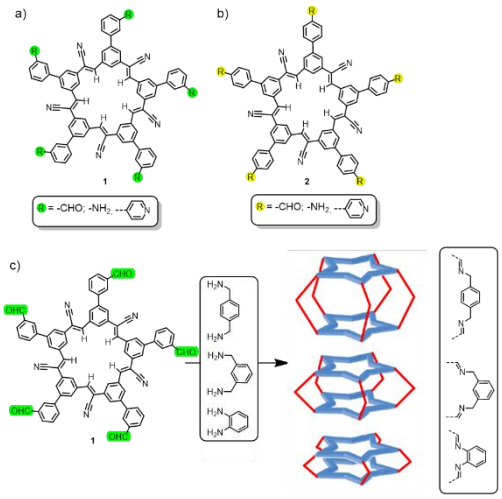


Figura 3: Moleculas objetivo basadas en *cyanostar* para la obtención de cajas moleculares.

Referencias

1- S. Lee, C.-H. Chen, A. H. Flood, *Nat. Chem.* **2013**, *5*, 704-710.
2- E. M. Zahran, E. M. Fatila, C. Chen, A. H. Flood, L. G. Bachas, *Anal. Chem.* **2018**, *90*, 1925-1933.
3- E. M. Fatila, M. Pink, E. B. Twum, J. A. Karty, A. H. Flood, *Chem. Sci.* **2018**, *9*, 2863-2872.
4- W. Zhao, J. Tropp, B. Qiao, M. Pink, J. D. Azoulay, A. H. Flood, *J. Am. Chem. Soc.* **2020**, *142*, 2579-2591.

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 síntesis orgánica y determinación estructural. Se espera que el(la) alumno(a) tenga interés en aprender de estas disciplinas y otras transversales que afectan al desarrollo del proyecto especialmente aquellas relacionadas con la nanociencia (química macromolecular y supramolecular, materiales orgánicos, o fotofísicas, entre otras).

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

Es recomendable que el(la) estudiante opte por un itinerario que incluya las optativas: Materiales Orgánicos y Nanotecnología, así como Química Supramolecular. Se pretende que este proyecto TFM 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 anima de forma especial a estudiantes con buenos expedientes a solicitar este TFM.

MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGANICA
MENCIÓN DE MÁSTER EXCELENTE XUNTA DE GALICIA

PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2025-2026

DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE

Apellidos y nombre del director(es) del proyecto: DE LA TORRE PONCE, GEMA; SÁNCHEZ FERNÁNDEZ, DAVID	
Cargo: CATEDRÁTICA; BECARIO FPI	
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 CAVIDADES METAL-ORGÁNICAS DE Pt(II)-FTALOCIANINA PARA SU APLICACIÓN EN TRATMIENTOS 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 oncológicas y puede ser aplicada sola o en combinación con otros protocolos de quimioterapia, radioterapia o cirugía.[1]

Figura 1

La 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 el oxígeno molecular, que se encuentra en un estado triplete ($^3O_2$) presente en el medio celular, lo que genera especies reactivas de oxígeno (radicales, peróxido de hidrógeno…) así como ***oxígeno singlete ($^1O_2$).*** Estas especies son capaces de iniciar reacciones en cadena y son las principales responsables de los daños oxidativos y la muerte celular.

Un agente PS ideal[2] 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 alta absorbancia en el rojo (región de 600-800 nm denominada ***ventana terapéutica***), para que la luz sea capaz de penetrar en los tejidos.

Las ***ftalocianinas (Pcs)*** (**Figura 2**) son macrociclos aromáticos derivados de porfirina que presentan absorciones intensas en la zona del visible, típicamente entre 670-700 nm. Estos compuestos han sido, con diferencia, los PS preferidos para PDT, debido a: i) su i***ntensa absorción dentro del rango de la ventana terapéutica***; ii) su ***alto rendimiento cuántico en la generación de oxígeno singlete***); iii) su escasa o nula toxicidad en ausencia de luz en la mayoría de los casos; y iv) su flexibilidad estructural, que permite introducir grupos funcionales que aportan solubilidad en agua y biocompatibilidad. En concreto las Pcs que contienen en su cavidad zinc (II) (**Figura 2**, M = Zn) han demostrado destacadas capacidades fotosensibilizadoras.

[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.

Las cavidades tridimensionales han despertado un interés creciente en el campo de la nanomedicina. Gracias a su capacidad de reconocimiento molecular, estas "cajas" pueden encapsular moléculas, lo que permite su uso como contenedores moleculares para mejorar, por ejemplo, la biodisponibilidad de los fármacos encapsulados y reducir sus efectos secundarios. Gracias a la combinación de la capacidad de encapsulación con la presencia de PS orgánicos en la estructura de estas cajas, se espera que estos sistemas moleculares actúen de forma sinérgica, desempeñando simultáneamente funciones como transportadores de fármacos y agentes para PDT (ver **Figura 3**).

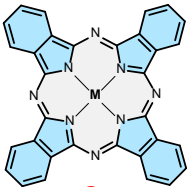


Figura 2. Estructura de una ftalocianina (Pc)

Entre las distintas estrategias para construir cavidades supramoleculares, la química de coordinación ofrece numerosas ventajas. Dado que estos sistemas se construyen mediante interacciones no covalentes metal-ligando, su obtención tiene lugar de manera sencilla y bajo condiciones suaves, sin necesidad de procedimientos sintéticos complejos, obteniéndose así fácilmente estructuras con geometrías bien definidas dirigidas por la coordinación del metal. En concreto, las cavidades metal-orgánicas de Pt(II) construidas con ligandos derivados de PS (como pueden ser las Zn(II)Pcs) representan una estrategia prometedora para el tratamiento del cáncer, ya que pueden dar lugar a efectos fototerapéuticos y quimioterapéuticos sinérgicos, pues es bien conocido que las sales de Pt(II) se intercalan en el material genético de las células, deformando la doble hélice del ADN e impidiendo su replicación. Otras ventajas adicionales de estas cavidades metal-orgánicas son: i) el ensamblaje de múltiples PS en una única estructura, lo que puede inducir un aumento en la eficacia de la PDT; ii) la posibilidad de encapsular y transportar al interior celular otros fármacos citotóxicos que contribuyan a eliminar las células cancerosas.

En nuestro grupo de trabajo, se han preparado recientemente una serie de sistemas metal-orgánicos formados por PS funcionalizados con piridinas que se coordinan a sales de Pt(II), y que contienen además unidades de glucosa que contribuyen a aumentar la solubilidad en agua (G. Durán-Sampedro, E. Y. Xue, M. Moreno-Simoni, C. Paramio, T. Torres, D. K. P. Ng, G. de la Torre, *J. Med. Chem.* **2023**, *66*, 3448). Los ensayos biológicos llevados a cabo con estos sistemas han mostrado que la toxicidad del ensamblado metal-orgánico es superior a la de los componentes por separado (i.e., PS y $PtCl_2(PEt_3)_2$), observándose por tanto un efecto sinérgico. Además, las unidades de glucosa mejoran la internalización selectiva hacia las células cancerosas, ya que éstas, debido a su metabolismo activado, presentan sobreexpresados los receptores de glucosa.

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

a) La ***síntesis de ligandos tetratópicos basados en Zn(II)Pcs*** (**Figura 3**). Esta estrategia se basa en una condensación cruzada entre dos precursores sencillos, de tipo 1,2-dicianobenceno (i.e. ftalonitrilo), uno de ellos funcionalizado con sustituyentes voluminosos fenilo bis(trifluorometilo)—que no sufre auto-condensación por impedimento estérico—y otro ftalonitrilo funcionalizado con ligandos piridina. Como resultado, se obtienen Zn(II)Pcs con una disposición rectangular de ligandos donadores piridina. Estos ligandos tetratópicos pueden dar lugar a cajas metal-orgánicas prismáticas (**Figura 3**) cuando se realiza el ensamblaje con ligandos lineales complementarios de tipo trifenildicarboxilato, en presencia de sales de Pt(II). Cabe mencionar que estos ligandos basados en unidades de trifenilo se funcionalizarán de manera complementaria con unidades de glucosa, para así aumentar la solubilidad en agua del ensamblado metal-orgánico final y la internalización selectiva en células tumorales.

b) Se llevarán a cabo estudios para determinar la capacidad de estos sistemas para generar especies citotóxicas de oxígeno singlete al ser irradiadas con luz visible. También se valorará la capacidad de estas cavidades metal-orgánicas para encapsular otros fármacos citotóxicos.

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

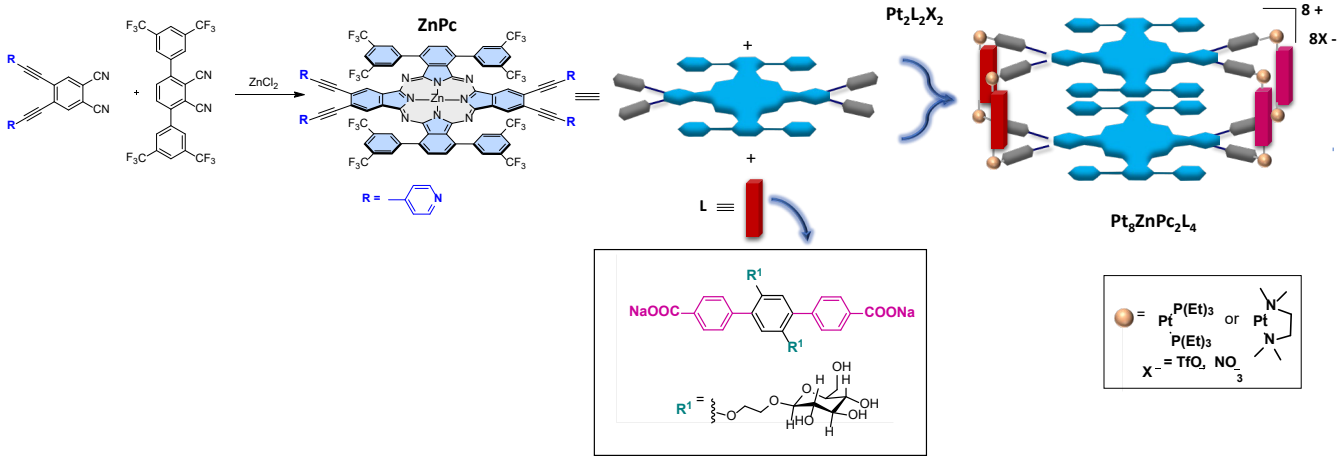


Figura 3.

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

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 fotofísica y en ensayos biológicos *in vitro*.

MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGANICA
MENCIÓN DE MÁSTER EXCELENTE XUNTA DE GALICIA

PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2025-2026

DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE

Apellidos y nombre del director(es) del proyecto: Mª Belén Cid de la Plata	
Cargo: Profesora Titular	
Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto: Departamento Química Orgánica (UAM)	
Teléfono directo: 91 4975505	**e-mail:** belen.cid@uam.es

DATOS DEL PROYECTO

Título: Estudio de nuevas estrategias de preparación de derivados de ácidos carboxílicos con alenos en posición β enantioenriquecidos

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

Los alenos son compuestos orgánicos caracterizados por la presencia de dos dobles enlaces consecutivos (C=C=C) en átomos de carbono adyacentes. Esta singular estructura, presente también en diversos compuestos naturales, les confiere propiedades electrónicas y geométricas únicas (Figura 1). Los alenos se consideran intermedios altamente versátiles en síntesis orgánica, ya que permiten construir estructuras moleculares complejas y tienen aplicaciones en catálisis, ciencia de materiales y química médica. Por estas razones, se han desarrollado numerosos métodos para su preparación y transformación.[1]

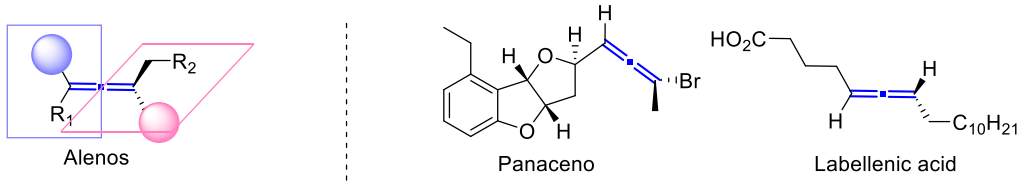


Figura 1. Estructura general de un aleno y ejemplos de productos naturales que contienen la unidad estructural de aleno.

Los alenos pueden tener **quiralidad axial** cuando los sustituyentes en los carbonos terminales son diferentes. El carbono central posee hibridación **sp** y los dos enlaces dobles están dispuestos en planos perpendiculares, esta geometría define un **eje de quiralidad** a lo largo de la secuencia de los enlaces carbono-carbono-carbono. Como resultado, los sustituyentes de los extremos quedan orientados en planos diferentes (Figura 2).

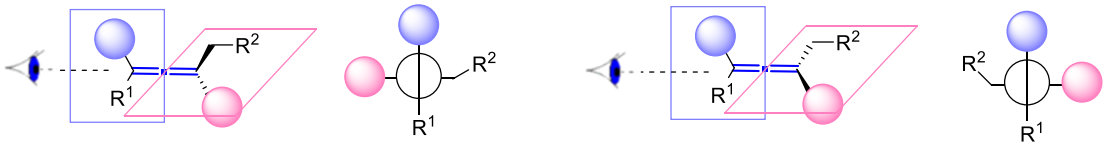
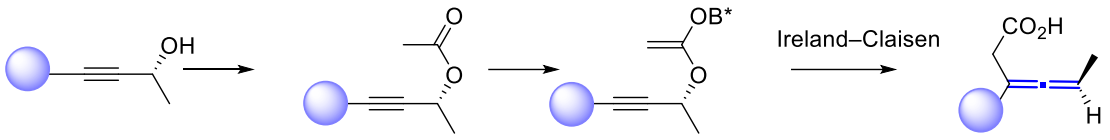


Figura2. Alenos enantiómeros.

A pesar de su potencial, la preparación eficiente de alenos enantiomericamente puros sigue representando un desafío sintético relevante. Las metodologías tradicionales suelen requerir condiciones reactivas poco compatibles con otras funciones, ofrecen escaso control estereoquímico o hacen uso de precursores poco accesibles. En los últimos años, el desarrollo de catalizadores metálicos y organocatalíticos ha mejorado la obtención de alenos con alto grado de pureza enantiomérica.[2] Sin embargo, su aplicación en la preparación de derivados de ácidos carboxílicos con alenos en posición β permanece limitada, lo que motiva la búsqueda de nuevas estrategias sintéticas para acceder a estos compuestos de manera más eficiente y selectiva.

El presente proyecto tiene como objetivo el desarrollo de **nuevas metodologías sintéticas para la formación de allenos enantiopuros bajo condiciones suaves y sostenibles, con un enfoque en la selectividad, la compatibilidad funcional y accesibilidad de los reactivos de partida**. La síntesis eficiente de estas unidades facilitará el acceso a nuevos compuestos bioactivos, especialmente ácidos carboxílicos y derivados con aleno en posición β.

Para acceder a estos compuestos, una de las estrategias que proponemos el uso de una reacción tipo **Ireland–Claisen,** que permitiría partir de alcoholes propargílicos, compuestos fácilmente accesibles. Con el objetivo de obtenerlos en forma enantioméricamente pura en ambas configuraciones, planteamos emplear **enolatos de boro quirales** como intermedios clave en la transformación (Esquema 1).[3]



B*= reactivo de boro quiral

Esquema 1. Ireland–Claisen asimétrica para la obtención de ácidos β-alenilos.

En caso de que esta estrategia presente problemas, se explorarán alternativas como la transformación de alquinos en alenos mediante el uso de bases quirales.

1. (a) Krause, N.; Hashmi, A. S. K. *Modern Allene Chemistry*; Wiley: Weinheim, 2004. (b) Ma, S. *Some Typical Advances in the Synthetic Applications of Allenes*, *Chem. Rev.* **2005**, *105*, 2829–2871. (c) Brummond, K. M.; DeForrest, J. E. *Synthesizing Allenes Today (1982-2006)*, *Synthesis* **2007**, *6*, 795–818. (d) Ye, J.; Ma, S. *Conquering three-carbon axial chirality of allenes, Org. Chem. Front.* **2014**, *1*, 1210–1224. (e) Li, Y.; Bao, H. *Radical transformations for allene synthesis*, *Chem. Sci.* **2022**, *13*, 8491–8506.

2. (a) Xiao, W.; Wu, J. *Recent advances in the metal-catalyzed asymmetric synthesis of chiral allenes, Org. Chem. Front.* **2022**, *9*, 5053–5073. (b) Wang, X.; Chen, X.; Lin, W.; Li, P.; Li, W. Recent Advances in Organocatalytic Enantioselective Synthesis of Axially Chiral Allenes. *Adv. Synth. Catal.* **2022**, *364*, 1212– 1222.

3.Esta estrategia ha sido usada previamente en sustratos con dobles enlaces, en lugar de triples, para preparar ésteres alílicos no alénicos. Ver: Corey, E. J.; Lee, D. H. Highly Enantioselective and Diastereoselective Ireland-Claisen Rearrangement of Achiral Allylic Esters. *J. Am. Chem. Soc.* **1991**, *113*, 4026–4028.

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

Buena formación en química orgánica, con experiencia en técnicas básicas de laboratorio y conocimientos de elucidación estructural**.**

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 el trabajo en equipo. Al final del período de formación es esperable la adquisición de diferentes competencias y capacidades como conocimiento y dominio de los principales métodos para la síntesis, capacidad de planificación y organización del trabajo y desarrollo de espíritu crítico.

MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGANICA
MENCIÓN DE MÁSTER EXCELENTE XUNTA DE GALICIA

PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2025-2026

DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE

Apellidos y nombre del director(es) del proyecto: Mª Belén Cid de la Plata Ana Gonzalez Paredes	
Cargo: Profesora Titular Científica Titular	
Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto: Departamento Química Orgánica (UAM) e Instituto de Química Médica (CSIC)	
Teléfono directo: 91 4975505 91 258 75 52	**e-mail:** belen.cid@uam.es ana.gonzalez@iqm.csic.es

DATOS DEL PROYECTO

Título: Síntesis de lípidos polares con propiedades de estabilidad aumentada: evaluación de su incorporación en nanopartículas lipídicas para el transporte de fármacos.

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

Este proyecto llevado a cabo en colaboración entre el departamento de Química Orgánica (UAM) y el Instituto de Química Médica (CSIC) se centra en la síntesis de lípidos polares inspirados en los lípidos de membrana de los microrganismos del reino Archaea.

En la búsqueda de estrategias para mejorar la eficacia en la administración de fármacos y el desarrollo de vacunas, los lípidos arqueales han surgido como una nueva alternativa en nanotecnología y biomedicina. Estos lípidos poseen una estructura única caracterizada por cadenas de isoprenoides unidas al glicerol mediante enlaces éter en las posiciones 2 y 3 que les confiere propiedades fisicoquímicas especiales, como resistencia a la oxidación o hidrólisis en comparación con los lípidos tradicionales (Figura 1).

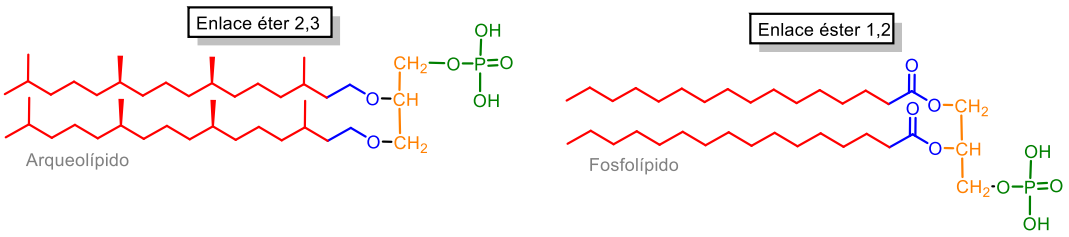
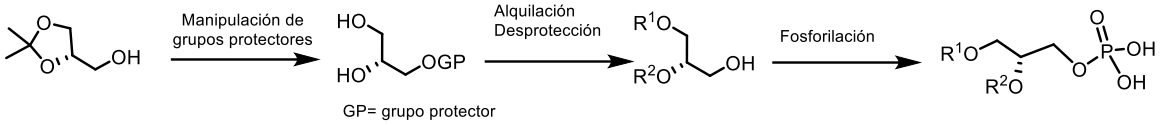


Figura 1

No obstante, los lípidos arqueales son difíciles de obtener de fuentes naturales. El proyecto tiene como objetivo determinar si los arqueosomas formados a partir de arqueolípidos sintéticos simples poseen propiedades similares que aquellos preparados a partir de arqueolípidos naturales. Lograr esto simplificaría enormemente y reduciría el costo necesario para las aplicaciones reales de los arqueosomas en la nanomedicina.

El trabajo se organizará de la siguiente manera:

1. Departamento de Química Orgánica (UAM): se estudiarán diferentes rutas sintéticas para la obtención de lípidos arqueales sintéticos. En el esquema 1 se muestra una de las posibles rutas.



Esquema 1

2. En el Instituto de Química Médica (CSIC) se llevarán a cabo las actividades siguientes:

2.1) Se utilizarán los lípidos sintetizados para elaborar liposomas y como control se prepararán liposomas con fosfolípidos tradicionales para realizar un estudio comparativo (Figura 2).

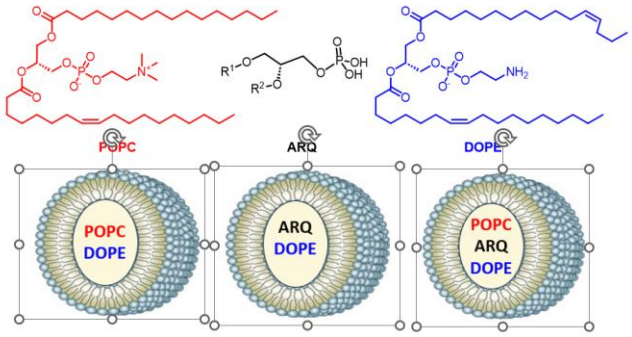


Figura 2

2.2) Caracterización fisicoquímica de los liposomas sintetizados. Se utilizarán técnicas como dispersión dinámica de luz (DLS), para determinar su tamaño, índice de polidispersión (PDI) y potencial zeta.
2.3) Estudios de estabilidad en diferentes tampones y temperaturas.

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 el trabajo en equipo. Al final del período de formación es esperable la adquisición de diferentes competencias y capacidades como conocimiento y dominio de los principales métodos para la síntesis y caracterización de liposomas y nanopartículas lipídicas; capacidad y rapidez de screening formulativo y capacidad de planificación y organización del trabajo y desarrollo de espíritu crítico.

MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGANICA
MENCIÓN DE MÁSTER EXCELENTE XUNTA DE GALICIA

PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2025-2026

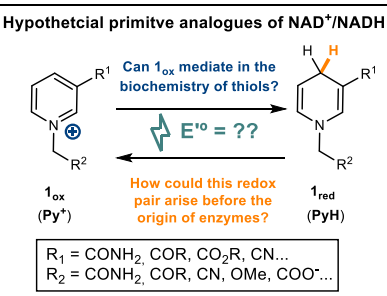
DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE

Apellidos y nombre del director(es) del proyecto: Andrés de la Escosura Navazo/ Javier Luis Barrera	
Cargo: Profesor Titular/ Personal Investigador	
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, Planta 4, Laboratorio L-401. Dirección: C/ Francisco Tomás y Valiente, 7, Madrid, 28049.	
Teléfono directo 914972773 / 914975884	**e-mail** andres.delaescosura@uam.es / javier.luis@uam.es

DATOS DEL PROYECTO

Título: Síntesis prebiótica de análogos de coenzimas y reactividad con compuestos de azufre

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



La química prebiótica, en la cual se enmarcará este TFM, es el estudio de rutas químicas plausibles que pudieron tener lugar en la Tierra Primitiva antes del surgimiento de los sistemas biológicos complejos y que pudieron dar lugar a la vida. Un de las preguntas claves en este campo es cómo pudieron surgir importantes biomoléculas que hoy desempeñan funciones bioquímicas fundamentales, como el cofactor NAD^+/NADH, implicado en multitud de reacciones rédox del metabolismo. Se ha postulado en trabajos previos que análogos estructuralmente mucho más sencillos del cofactor NAD^+/NADH pudieron estar presentes en la Tierra Primitiva y desempeñar un papel en las primeras redes químicas protometabólicas, en una época en la que todavía no se había desarrollado las enzimas. En este TFM se propone la búsqueda de condiciones, simulando un ambiente prebiótico, para la síntesis de dichos análogos del NAD^+/NADH y entender el mecanismo de dicho proceso.

Por otro lado, el metabolismo actual emplea como estrategia habitual la oxidación de tioles (como la coenzima A) para formar disulfuros o tioésteres, los cuales tienen una alta energía de hidrólisis, y así almacenar energía. Puesto que se ha postulado que el desarrollo de este proceso fue fundamental para el surgimiento de la vida, en este TFM se estudiará la capacidad de los mencionados análogos del cofactor NAD^+/NADH para mediar dichas reacciones rédox de tioles en condiciones prebióticas no enzimáticas, y así ahondar en el papel que pudieron tener en la evolución química.

El trabajo experimental incluirá el diseño y ejecución de reacciones bajo condiciones simuladas de la Tierra primitiva, incluyendo el uso de tampones y control de pH, atmósferas inertes, y la posible implicación de metales de transición como catalizadores rudimentarios. Se aplicarán técnicas de determinación estructural de Química Orgánica como resonancia magnética nuclear (RMN), cromatografía de gases-espectrometría de masas (GC-MS), espectroscopía UV-Visible, aplicadas a la detección, cuantificación y determinación de productos naturales y prebióticos. Este proyecto ofrece una formación práctica completa en química experimental, con especial atención a la síntesis, el seguimiento de reacciones y la interpretación estructural, introduciendo al estudiante en un área estimulante e interdisciplinar de la ciencia actual: el estudio del origen químico de la vida.

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

Se recomienda que el/la estudiante tenga algo de experiencia en síntesis orgánica y le motive interpretar espectros de RMN a nivel cuantitativo y cualitativo. Si bien a nivel práctico es un trabajo de Química Orgánica, es altamente recomendable que el estudiante tenga conocimientos básicos de Bioquímica y motivación por la Química Bioorgánica.

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

MASTERQO
MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGANICA
MENCIÓN DE MÁSTER EXCELENTE XUNTA DE GALICIA

UAM Universidad Autónoma de Madrid

UNIVERSIDAD COMPLUTENSE MADRID

USC UNIVERSIDADE DE SANTIAGO DE COMPOSTELA

XUNTA DE GALICIA

PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2025-2026

DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE

Apellidos y nombre del director(es) del proyecto: Javier Troyano	
Cargo: Investigador Ramón y Cajal	
Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto: Departamento de Química Inorgánica, Universidad Autónoma de Madrid	
Teléfono directo 91 497 6355	**e-mail** javier.troyano@uam.es

DATOS DEL PROYECTO

Título: Transformaciones químicas controladas en geles de COFs

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

Los COFs (covalent organic frameworks) son materiales reticulares puramente orgánicos con estructuras ordenadas y porosas.[1] Su capacidad de diseño permite ajustar su porosidad y funcionalidad, abriendo posibilidades para aplicaciones en almacenamiento de gases, catálisis, separación molecular y sensores. Además, su elevada estabilidad permite realizar modificaciones post-sintéticas, incorporando o sustituyendo grupos funcionales y ampliando las propiedades químicas y físicas del material.

En los últimos años, el desarrollo de geles coloidales de COF ha atraído gran interés en materiales porosos, por sus ventajas en procesabilidad, manejabilidad y propiedades finales.[2]

En este proyecto, la transformación controlada de geles coloidales de COF en materiales con gradientes composicionales será clave para acceder a un nuevo tipo de materiales con transporte direccional controlado. Mediante estas transformaciones post-sintéticas, se busca dotar a los materiales de gradientes direccionales (tamaño de poro, carga, carácter hidrofílico/hidrofóbico), permitiendo diseñar sistemas avanzados para transporte selectivo, separación y otras aplicaciones.

El proyecto comprenderá la síntesis de geles coloidales de COF que incorporen grupos funcionales específicos, los cuales permitan su posterior transformación. Posteriormente, se llevará a cabo el estudio de modificaciones post-sintéticas de forma controlada, de manera que se pueda regular el grado de transformación. En este contexto, se priorizarán los COFs que contengan grupos hidroxilo, ya que estos pueden transformarse en otras funciones químicas, via esterificación o alquilación.[3] Este tipo de transformaciones permitirá generar gradientes en el carácter hidrofílico/hidrofóbico, lo cual resulta especialmente beneficioso para lograr un transporte selectivo.

Se realizará la caracterización de los materiales obtenidos mediante técnicas como RMN y FTIR, así como técnicas específicas para materiales reticulares, incluyendo DRX y adsorción de gases. Además, se realizarán análisis elementales, y RMN de muestras digeridas para determinar de manera cuantitativa los gradientes composicionales resultantes.

En el caso de obtener materiales con las propiedades deseadas, se evaluarán, cuando sea posible, sus aplicaciones en energía azul y en generadores de electricidad a partir de la humedad ambiental.

1. K. Geng, T. He, R. Liu, S. Dalapati, K. T. Tan, Z. Li, S. Tao, Y. Gong, Q. Jiang and D. Jiang, 2020, Chem. Rev., 120, 8814-8933.
2. J. Á. Martín-Illán, D. Rodríguez-San-Miguel, O. Castillo, G. Beobide, J. Perez-Carvajal, I. Imaz, D. Maspoch and F. Zamora, 2021, Angew. Chem. Int. Ed., 60, 13969-13977.
3. N. Huang, X. Chen, R. Krishna and D. Jiang, 2015, Angew. Chem. Int. Ed., 54, 2986-2990.

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

Graduado en Química con experiencia (TFG) en síntesis química. Interés por la síntesis orgánica y ciencia de materiales. Es recomendable que el estudiante tenga conocimientos de caracterización estructural de compuestos orgánicos así como habilidad para comprender textos científicos en inglés y realizar búsquedas bibliográficas.

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

El proyecto se desarrollará en el Grupo Nanomater (https://nanomater.es) que cuenta con una amplia experiencia en investigación en el campo de la química reticular, materiales porosos y el desarrollo de materiales orgánicos e inorgánicos. La realización de este TFM permitirá al estudiante adquirir experiencia en síntesis orgánica, ciencia de materiales y materiales reticulares. Además, se formará en el uso de técnicas de caracterización como FTIR, RMN, DRX, adsorción de gases, microscopía electrónica y en el empleo de CO_2 supercrítico para la fabricación de aerogeles.

Máster Interuniversitario en Química Orgánica

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

Curso Académico 2025-2026

Director(es)	Título del Proyecto	Pág.
Aragoncillo, C. y Alonso, J.M.	Nuevas metodologías de carbo- y heterociclación con incorporación de halógeno para la síntesis de estructuras policíclicas con potencial actividad biológica y/o fotofísica	1
Benhamú, B. y Martín-Fontecha, M.	Síntesis de nuevas moléculas con aplicación terapéutica en el sistema inmune	3
Canales, M.A. y Castañar, L.	Aplicaciones de la Resonancia Magnética Nuclear al estudio de interacciones de moléculas con relevancia biológica	4
Cembellín, S.	Estrategias catalíticas avanzadas para la funcionalización de compuestos orgánicos de relevancia	5
Filippone, S.	Diseño y síntesis de nanografenos moleculares dopados y quirales	7
García, F.	Nuevos polímeros supramoleculares	8
García, A.	Desarrollo de compuestos orgánicos con aplicaciones en imagen biomédica	9
García, D.	Síntesis y caracterización de nanopartículas de carbono para aplicaciones avanzadas	10
Gómez, R. y Atienza, C.	Nuevos polímeros supramoleculares quirales	11
Herranz, M.A. y Rodríguez, L.	Puntos de carbono para aplicaciones en energía y catálisis	12
Illescas, B.M. y Cabrera, J.	Desarrollo de Plataformas Hetero-Multivalentes Basadas en [60]Fullereno para Aplicaciones en Terapia Dirigida	13
Illescas, B.M. y Herranz, M.A.	Diseño de nanoestructuras multivalentes basadas en BODIPYs y carbohidratos para aplicaciones en bioimagen y reconocimiento molecular	15
Lora, B.	Exploración de nuevas metodologías para la funcionalización dirigida de BODIPYs	17
Luna, A. y Almendros, P.	Nueva metodología sintética basada en sistemas insaturados utilizando catálisis metálica	19
Martín, N. y Fernández J.M.	Síntesis de nanografenos moleculares y estudio de sus propiedades optoelectrónicas	20
Martínez, T.	Nuevas metodologías sintéticas basadas en sistemas insaturados para la obtención de moléculas orgánicas relevantes	21
Martínez, P. y Vilela, D.	Diseño y preparación de sistemas de liberación controlada basados en nanomateriales mesoporosos funcionalizados con puertas moleculares estímulo-dependientes transportados por micromotores	23

Martínez, P. y Villalonga, R.	Desarrollo de ensamblajes moleculares para la preparación de sistemas de liberación controlada basados en nanomateriales mesoporosos	24
De la Moya, S. y Jiménez, F.	Exploración de BODIPYs como plataformas emisoras de luz quiral en medios no convencionales	25
Orellana, G. y Descalzo, A.B.	Moléculas fotoactivas para aplicaciones sensoras	27
Ortega, S. y Vázquez, H.	Desarrollo de PROTACs basados en cannabidiol	28
Roscales, S.	Síntesis de compuestos orgánicos con aplicaciones farmacológicas	29
Sánchez, L.	Síntesis de derivados luminiscentes de PDI en forma de L. Estudio de la capacidad de autoensamblaje y propiedades emisoras y quirópticas	30
Santos, J.M.	Síntesis de materiales con fluorescencia retardada activada térmicamente para dispositivos OLED	31
Segura, J.L. y Royuela, S.	Química reticular orgánica: Nuevas rutas sintéticas para materiales funcionales	32
Segura, J.L. y Royuela, S.	Síntesis y funcionalización de redes orgánicas covalentes (COFs): Nuevos materiales para aplicaciones sostenibles	34
Sierra, M.A. y Gómez, M.	Síntesis de sistemas polimetálicos miméticos de hidrogenasa para la bio-producción de hidrógeno verde usando metales de transición	36

PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2025-2026

DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE

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

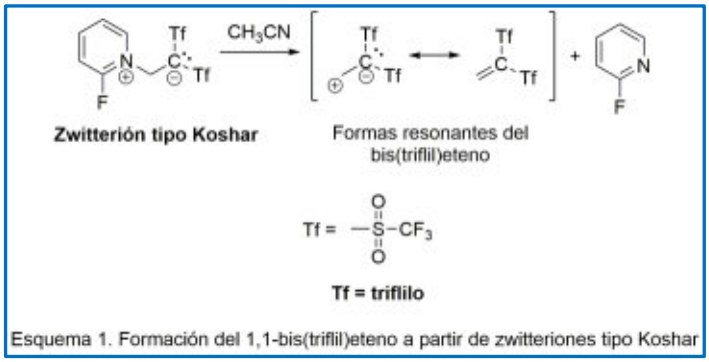
DATOS DEL PROYECTO

Título: Nuevas metodologías de carbo- y heterociclación con incorporación de halógeno para la síntesis de estructuras policíclicas con potencial actividad biológica y/o fotofísica

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

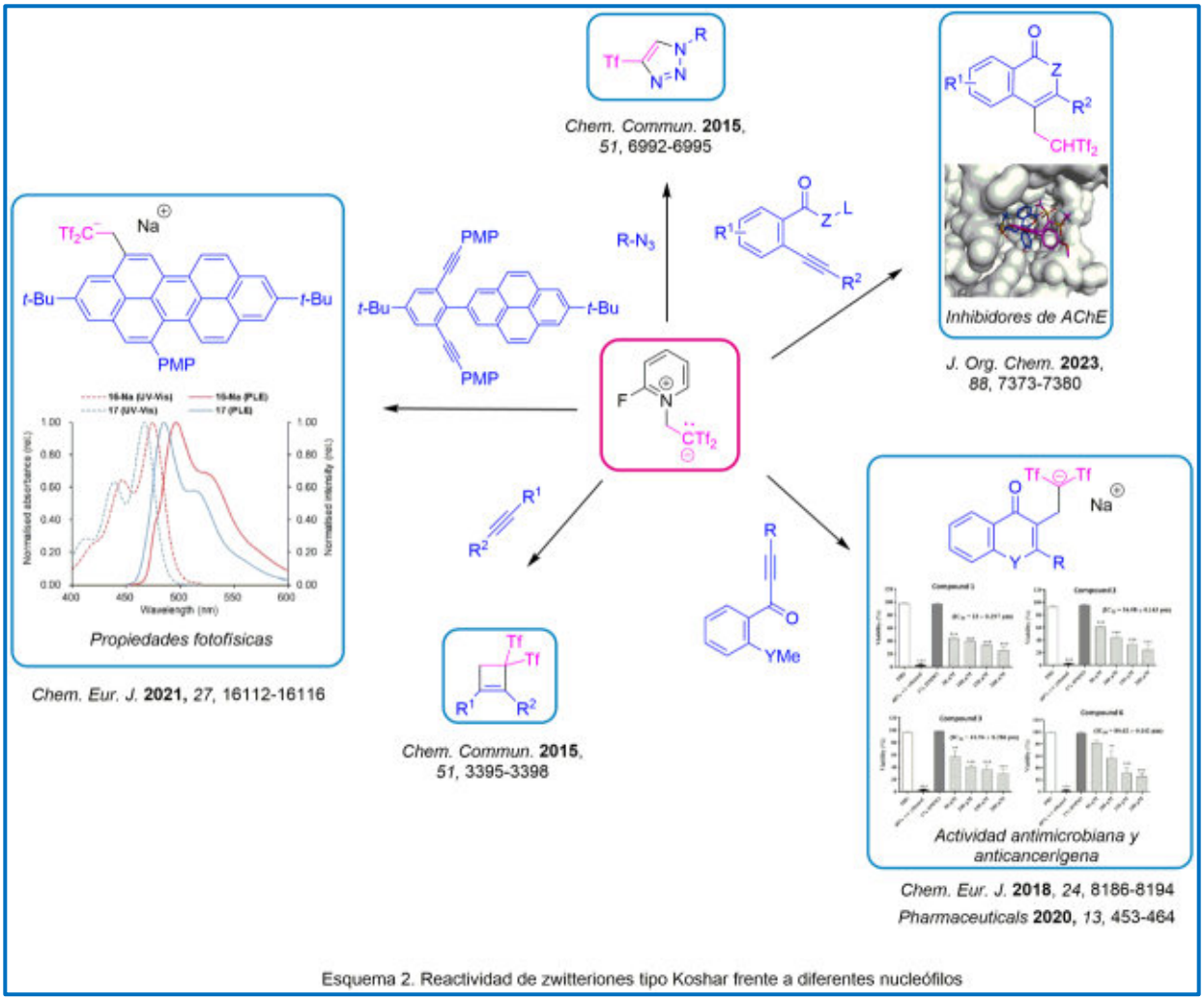
Nuestro Proyecto

Los zwitteriones son compuestos químicos con una carga positiva y una carga negativa en átomos diferentes. Concretamente, los zwitteriones de Koshar están formados por una unidad de piridinio y un carbanión que se encuentra estabilizado debido a la presencia de dos grupos triflilo, los más electroatractores en Química Orgánica. Aunque durante años estas moléculas han sido consideradas simples curiosidades químicas, nuestro grupo de investigación ha descubierto que poseen una reactividad única. Así, cuando los zwitteriones de Koshar están en disolución, se disocian lentamente en la correspondiente piridina y en una molécula de bis(triflil)eteno. Esta olefina es tan reactiva que no se puede aislar ni manipular. Sin embargo, sí se puede atrapar en el medio de reacción con un nucleófilo dando lugar a un gran número de moléculas diferentes, lo que nos ha permitido descubrir mecanismos de reacción diversos, y a veces inesperados (Esquema 1).



Esquema 1. Formación del 1,1-bis(triflil)eteno a partir de zwitteriones tipo Koshar

De esta manera, hemos descrito la síntesis de heterociclos funcionalizados con átomos de flúor como triazoles, isocumarinas o isoflavonas. También hemos preparado ciclobutenos, estructuras de gran tensión anular y difíciles de preparar por otras vías, o hidrocarburos poliaromáticos perfluorados. Además, en colaboración con otros grupos de investigación, hemos explorado posibles aplicaciones de estas moléculas (Esquema 2).



Esquema 2. Reactividad de zwitteriones tipo Koshar frente a diferentes nucleófilos

Objetivos

- Desarrollo de metodologías sintéticas alternativas con zwitteriones de Koshar y nuevos nucleófilos.
- Estudio del mecanismo de las nuevas reacciones.

Tareas a realizar

1. Síntesis orgánica

- Aprender a preparar y purificar los zwitteriones de Koshar.
- Llevar a cabo nuevas reacciones químicas con el zwitterión y diferentes nucleófilos. Para ello, se aprenderán diferentes métodos de síntesis como:

  - Reacciones a baja temperatura
  - Irradiación por microondas
  - Técnicas Schlenk
  - Reacciones bajo atmósfera de argón

2. Purificación y análisis de los nuevos compuestos

- Aprender a preparar muestras para análisis por RMN, espectroscopía de masas, e IR.
- Identificar y asignar las nuevas estructuras interpretando los resultados analíticos.
- Interpretar RMN bidimensionales, experimentos nOe, etc…

3. Comunicación de resultados científicos

- Preparar un Póster resumiendo el trabajo realizado y aprender a exponerlo en público.
- Elaborar la Memoria final y la Presentación oral para su defensa ante el Tribunal evaluador.

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 ORGANICA
MENCIÓN DE MÁSTER EXCELENTE XUNTA DE GALICIA

PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2025-2026

DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE

Apellidos y nombre del director(es) del proyecto: Benhamú Salama Bellinda y Martín-Fontecha Corrales Mar	
Cargo: Profesoras Titulares	
Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto: Dpto. de Química Orgánica, UCM – Laboratorio de Química Médica	
Teléfono directo 913945156 y 913944316	**e-mail** bellinda.benhamu@quim.ucm.es y marfont@opt.ucm.es

DATOS DEL PROYECTO

Título: Síntesis de nuevas moléculas con aplicación terapéutica en el sistema inmune
Breve descripción de los objetivos, contenido del proyecto y tareas a realizar El proyecto consiste en la síntesis de nuevas moléculas como parte de un proyecto dirigido al estudio de su potencial efecto antiinflamatorio para el tratamiento de enfermedades relacionadas con el sistema inmune. El proyecto implicará el aprendizaje y desarrollo de metodologías sintéticas
Capacidades y conocimientos recomendables que debe tener el estudiante para la realización de este proyecto 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 Formación en el área de Química Médica en un entorno multidisciplinar

MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGANICA
MENCIÓN DE MÁSTER EXCELENTE XUNTA DE GALICIA

PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2025-2026

DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE

Apellidos y nombre de las directoras del proyecto: Castañar Acedo Laura Canales Mayordomo María Ángeles	
Cargo: Personal Docente Investigador (Atracción de Talento de la CAM) Profesor Titular	
Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto: Química Orgánica, Facultad de Ciencias Químicas UCM, Avd. Complutense s/n 28040 Madrid	
Teléfono directo: 913948479	**e-mail:** lcastana@ucm.es

DATOS DEL PROYECTO

Título: Aplicaciones de la Resonancia Magnética Nuclear al estudio de interacciones de moléculas con relevancia biológica
Breve descripción de los objetivos, contenido del proyecto y tareas a realizar Los mecanismos de reconocimiento molecular desempeñan un papel esencial en numerosos procesos fisiológicos y patológicos. Comprender en detalle las interacciones que los regulan es clave para el avance de disciplinas como la química médica. Este proyecto tiene como objetivo desarrollar y optimizar experimentos de Resonancia Magnética Nuclear (RMN) para caracterizar biomoléculas implicadas en estos procesos, en particular glicoproteínas y glicanos, y profundizar en los mecanismos de reconocimiento molecular en los que participan. Las tareas a realizar incluirán la preparación de muestras, la adquisición y procesamiento de datos, así como el análisis e interpretación de experimentos avanzados de RMN.
Capacidades y conocimientos recomendables que debe tener el estudiante para la realización de este proyecto Conocimientos básicos de interpretación de espectros de RMN mono y bidimensional.
Indíquese cualquier otra aclaración que se considere que pueda ayudar a los estudiantes en la elección del TFM Durante la realización de este Trabajo de Fin de Máster, el estudiante adquirirá competencias en el manejo de equipos de RMN, así como en el uso de diversas herramientas informáticas para la adquisición, procesamiento y análisis de espectros de RMN. Esta formación proporcionará al estudiante habilidades técnicas y transversales fundamentales para desarrollar su actividad tanto en centros de investigación como en empresas tecnológicas del ámbito de la Química Orgánica.

MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGANICA
MENCIÓN DE MÁSTER EXCELENTE XUNTA DE GALICIA

PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2025-2026

DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE

Apellidos y nombre del director(es) del proyecto: CEMBELLÍN SANTOS, SARA	
Cargo: PROFESORA CONTRATADA DOCTORA	
Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto: DEPARTAMENTO DE QUÍMICA ORGÁNICA, FACULTAD DE CIENCIAS QUÍMICAS, UNIVERSIDAD COMPLUTENSE DE MADRID, Avenida Complutense sn, 28040, Madrid	
Teléfono directo: 913945143	**e-mail:** scembellin@ucm.es

DATOS DEL PROYECTO

Título: ESTRATEGIAS CATALÍTICAS AVANZADAS PARA LA FUNCIONALIZACIÓN DE COMPUESTOS ORGÁNICOS DE RELEVANCIA

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

Tanto en la investigación académica como en la industria, existe un creciente interés en el desarrollo de métodos más eficientes, rentables y ecológicamente sostenibles que permitan acceder a moléculas complejas. La activación de enlaces C–H catalizada por metales de transición representa un enfoque eficaz, eliminando la necesidad de los pasos de pre-funcionalización de los materiales de partida presentes en los métodos tradicionales. Esto permite el uso de sustratos menos funcionalizados, mejorando la economía atómica y la eficiencia temporal en las síntesis orgánicas. En las últimas décadas, la activación de enlaces C–H se ha utilizado con éxito para construir nuevos enlaces carbono-carbono y carbono-heteroátomo a partir de sustratos hidrocarburos fácilmente disponibles, beneficiando campos como la farmacéutica y la ciencia de materiales. Sin embargo, y a pesar de los avances significativos en este campo, la búsqueda de catalizadores y métodos que sean más eficientes y ampliamente aplicables, junto con la búsqueda de condiciones de reacción más sostenibles, sigue siendo un desafío continuo.

En cuanto a la sostenibilidad, una de las soluciones que ha obtenido mayor atención en los últimos años ha sido el empleo de metales de la primera serie en reacciones de funcionalización de C–H, gracias a la mayor abundancia, menor coste y menor toxicidad de estos catalizadores en comparación con los metales preciosos frecuentemente utilizados. En este contexto, en nuestro grupo de investigación nos centramos en el desarrollo de transformaciones novedosas quimio-, regio- y estereoselectivas utilizando esta estrategia de activación de C−H catalizada por metales de la primera fila como el manganeso y el cobalto.

Específicamente, nuestras investigaciones recientes demuestran la inserción efectiva de agentes de acoplamiento insaturados mediante la activación de C−H de arenos, heteroarenos y alquenos catalizada por metales abundantes, siendo capaces de sintetizar moléculas orgánicas valiosas como 1,3-dienos, alcoholes alílicos, isoquinolonas y núcleos complejos con diferentes funcionalidades con total regioselectividad y a escala preparativa. Estas metodologías representan un avance sobre las transformaciones clásicas de activación C−H, evitando en la mayoría de los casos la necesidad de las drásticas condiciones de reacción asociadas con ellas, como altas temperaturas, solventes tóxicos y halogenados, y oxidantes químicos como las sales de cobre(II) y plata(I) (Figura 1).

De esta manera, el proyecto consistirá en el desarrollo de una nueva reacción de funcionalización C−H que permita la preparación selectiva de moléculas orgánicas complejas, que puedan presentar importantes propiedades bioactivas o estructurales, empleando para ello condiciones de reacción sencillas y más sostenibles con el medio ambiente.

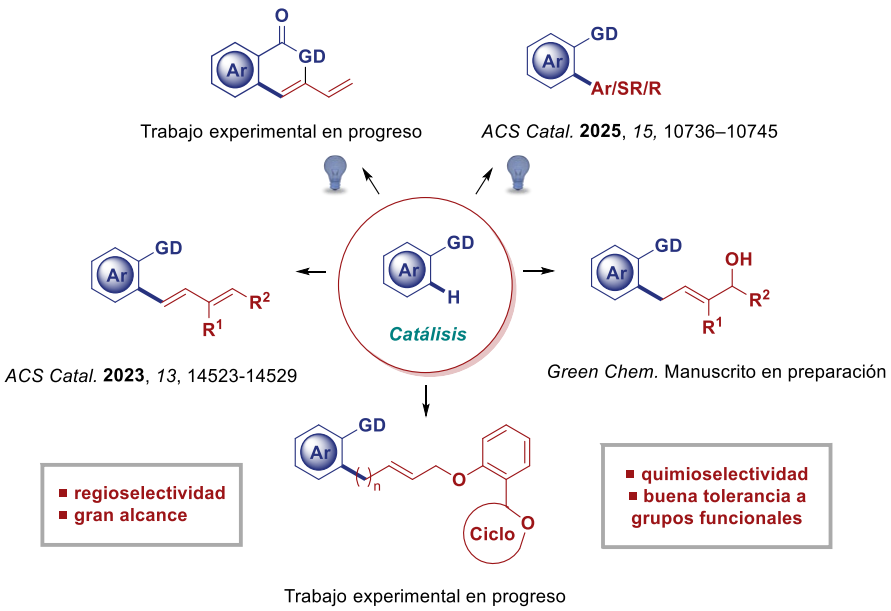


Figura 1. Reacciones de funcionalización C–H estudiadas en el grupo de investigación. GD: Grupo director.

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

Graduado en Química o Doble Grado Química-Bioquímica con experiencia (TFG) en Química Orgánica y/o Química Inorgánica.

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

Para más información sobre la investigación llevada a cabo en nuestro grupo de trabajo véase:

https://x.com/greencatlab

https://x.com/scscembellin

https://orcid.org/0000-0001-9884-9042

MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGANICA
MENCIÓN DE MÁSTER EXCELENTE XUNTA DE GALICIA

PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2025-2026

DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE

Apellidos y nombre del director(es) del proyecto: Filippone Salvatore	
Cargo: Profesor Titular	
Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto: Departamento de Química Orgánica- Universidad Complutense de Madrid	
Teléfono directo **913944325**	**e-mail: salvatorefilippone@ucm.es**

DATOS DEL PROYECTO

Título: Diseño y Síntesis de Nanografenos Moleculares Dopados y Quirales

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

Este proyecto tiene como objetivo la síntesis de nanografenos moleculares que integren en su estructura tanto átomos de nitrógeno cuaternario como elementos de quiralidad.

La estrategia sintética se basa en la formación directa de sales de N-aril piridinio, avanzando hacia derivados de quinolizinio con sistemas π-extendidos (subestructura resaltada en rojo en Figura 1), lo que permitirá incrementar progresivamente la conjugación hasta obtener nanografenos catiónicos dopados con nitrógeno. Sobre estas rutas se aplicarán métodos de inducción asimétrica, con el fin de lograr la síntesis enantioselectiva de estas nanoestructuras quirales.

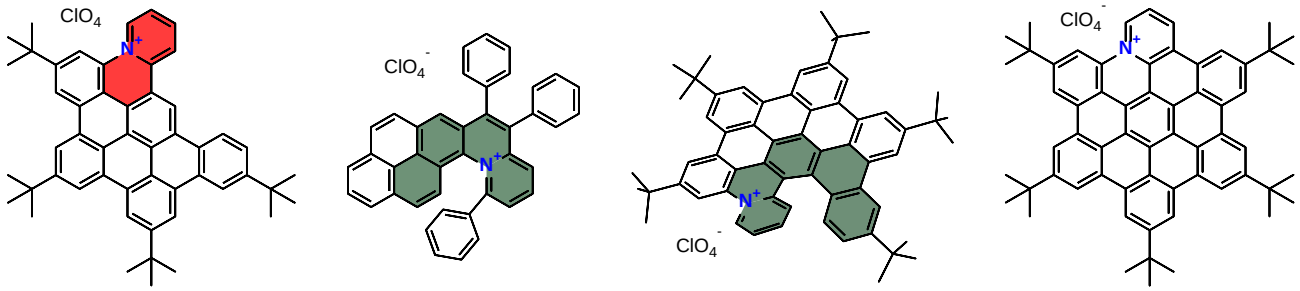


Figura 1. Hidrocarburo poliaromático y nanografenos moleculares dopados con N^+. En verde se resaltan las subestructuras con quiralidad helicoidal.

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

Se requiere 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 estudiante tendrá la oportunidad de familiarizarse con los métodos y técnicas más comunes en un laboratorio de química orgánica. En particular, aprenderá el manejo de la cromatografía líquida de alta eficacia (HPLC), así como la adquisición e interpretación de espectros de dicroísmo circular y de luminiscencia polarizada circularmente (CPL).

Cualquier estudiante interesado en este proyecto está cordialmente invitado a ponerse en contacto conmigo antes de presentar su solicitud.

MASTERQO
MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGANICA
MENCIÓN DE MÁSTER EXCELENTE XUNTA DE GALICIA

UAM Universidad Autónoma de Madrid
UNIVERSIDAD COMPLUTENSE MADRID
USC UNIVERSIDADE DE SANTIAGO DE COMPOSTELA
XUNTA DE GALICIA

PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2025-2026

DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE

Apellidos y nombre del director(es) del proyecto: García Melo, Fátima	
Cargo: Profesora Titular	
Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto: Departamento de Química Orgánica, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Complutense de Madrid.	
Teléfono directo: 913945143	**e-mail:** fatgar02@ucm.es

DATOS DEL PROYECTO

Título: Nuevos polímeros supramoleculares

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

En este proyecto el alumno/a aplicará técnicas de síntesis orgánica (reacciones de acoplamiento C-C catalizadas por Pd, reacciones de formación de amidas, etc.) para obtener moléculas orgánicas que sean capaces de dar lugar a polímeros supramoleculares helicoidales mediante la formación de enlaces de hidrógeno intermoleculares e interacciones de apilamiento aromático (Figura 1). La introducción de centros estereogénicos en las cadenas periféricas se espera que dé lugar a agregados helicoidales de helicidad preferente. Estas moléculas, además, se funcionalizarán con fragmentos con actividad catalítica y se evaluará la capacidad de estas moléculas para formar estructuras supramoleculares mediante técnicas ópticas (UV-vis, fluorescencia, dicroísmo circular, etc.) y espectroscópicas (RMN). Por último, se evaluará la capacidad catalítica de estos polímeros supramoleculares.

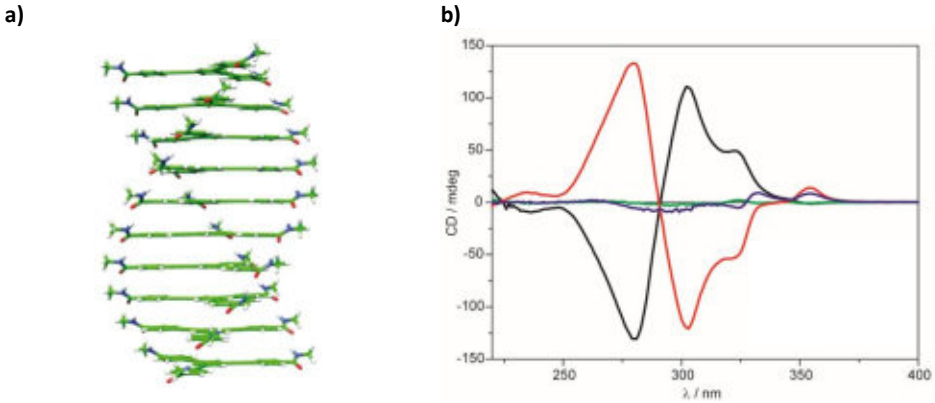


Figura 1. *a) Agregados helicoidales formados a través de enlaces de hidrógeno intermoleculares e interacciones de apilamiento aromático. b) Espectros de dicroísmo circular de polímeros supramoleculares que presentan centros estereogénicos.*

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. Es deseable que el estudiante tenga elevada motivación y capacidad de 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 ORGANICA
MENCIÓN DE MÁSTER EXCELENTE XUNTA DE GALICIA

PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2025-2026

DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE

Apellidos y nombre del director(es) del proyecto: Aurelio García Csáky	
Cargo: Catedrático de Universidad	
Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto: Instituto Pluridisciplinar UCM	
Teléfono directo	**e-mail** **csaky@ucm.es**

DATOS DEL PROYECTO

Título: Desarrollo de compuestos orgánicos con aplicaciones en imagen biomédica
Breve descripción de los objetivos, contenido del proyecto y tareas a realizar Síntesis de compuestos orgánicos destinados a actuar como sondas fluorescentes para la monitorización de propiedades intracelulares *in vivo* a partir de su anclaje a microchips de silicio (SPAchip Techology)
Capacidades y conocimientos recomendables que debe tener el estudiante para la realización de este proyecto Conocimientos de síntesis orgánica y determinación estructural.
Indíquese cualquier otra aclaración que se considere que pueda ayudar a los estudiantes en la elección del TFM

MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGANICA
MENCIÓN DE MÁSTER EXCELENTE XUNTA DE GALICIA

PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2025-2026

DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE

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

DATOS DEL PROYECTO

Título: Síntesis y caracterización de nanopartículas de carbono para aplicaciones avanzadas.
Breve descripción de los objetivos, contenido del proyecto y tareas a realizar Preparación y caracterización de nuevos materiales basados en nanoestructuras de carbono, mediante síntesis por láser pulsado, para el desarrollo de aplicaciones en las áreas biomédica, medioambiental, energética y de síntesis orgánica. Síntesis, aislamiento y purificación de compuestos químicos orgánicos y materiales basados en nanoestructuras de carbono. Caracterización estructural general (FTIR, RMN, EM, microscopía) y fotofísica (espectros de absorción y emisión UV-Vis) de las moléculas y los nanomateriales. Desarrollo de experimentos de caracterización específica de los compuestos sintetizados, según el ámbito de aplicación de estos.
Capacidades y conocimientos recomendables que debe tener el estudiante para la realización de este proyecto 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 Interés por el desarrollo de nuevos materiales con propiedades optoelectrónicas de interés en nanociencia y nanotecnología. Interés por los procesos fotoquímicos 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 nanomateriales de carbono. Interés por las aplicaciones de la Química en la Ciencia y Tecnología modernas, y por el impacto que estas aplicaciones tienen en la Sociedad.

MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGANICA
MENCIÓN DE MÁSTER EXCELENTE XUNTA DE GALICIA

PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2025-2026

DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE

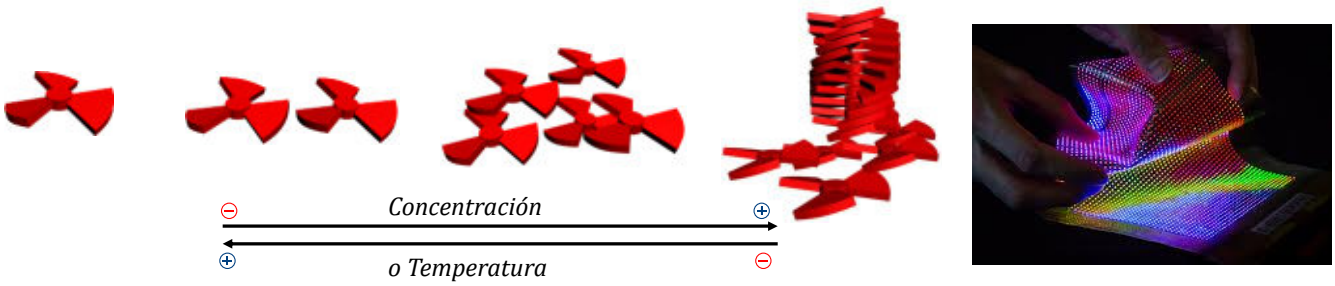
Apellidos y nombre del director(es) del proyecto: Gómez Aspe, Rafael / Atienza Castellanos, Carmen	
Cargo: Profesor / Profesora Titular de Universidad	
Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto: Química Orgánica	
Teléfono directo 913944333 / 913945155	**e-mail** rafaelgomez@quim.ucm.es/ cmatienz@quim.ucm.es

DATOS DEL PROYECTO

Título: Nuevos polímeros supramoleculares quirales

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

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 ORGANICA
MENCIÓN DE MÁSTER EXCELENTE XUNTA DE GALICIA

PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2025-2026

DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE

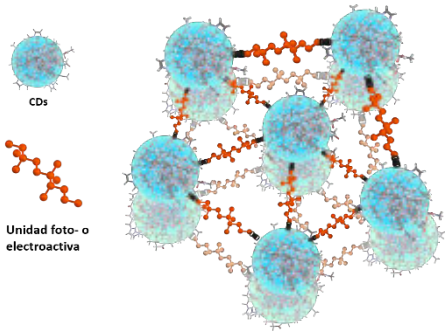
Apellidos y nombre del director(es) del proyecto: Herranz Astudillo, Mª Ángeles / Rodríguez Pérez, Laura	
Cargo: Catedrática de Universidad / Profesora Contratada Doctora	
Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto: Departamento de Química Orgánica,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

DATOS DEL PROYECTO

Título: Puntos de carbono para aplicaciones en energía y catálisis

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

Los puntos de carbono (*carbon dots*, CDs) son nanomateriales orgánicos fluorescentes con un color de emisión que se puede modular con la composición y la funcionalización química, lo que está posibilitando su aplicación en distintas áreas de gran impacto social dentro de la química como son la energía, la catálisis o la biomedicina. Adicionalmente, son materiales cuya síntesis es fácilmente escalable, y son bio- y medioambientalmente compatibles.



Los CDs han sido utilizados como material fotoactivo en células solares orgánicas, células solares sensibilizadas por colorante o de tipo Grätzel, o como fotocatalizadores. La investigación ha estado, en algunos casos, relacionada con el diseño de capas selectivas de carga de alta eficiencia como los transportadores de electrones y de huecos. Aunque las capas selectivas de carga pueden presentar una estructura polimérica o mesoporosa, los CDs no han sido investigados en este sentido, y por eso en este trabajo se plantea la construcción de una nueva familia de arquitecturas basadas en el ensamblado tridimensional de CDs. Aprovechando los ácidos carboxílicos y los grupos amino presentes en la superficie de los CDs llevaremos a cabo reacciones de esterificación o de formación de iminas, con moléculas que contengan unidades foto- o electroactivas y la funcionalización adecuada en su estructura. Se estudiarán moléculas de cadena rígida y flexible y se evaluará su viabilidad para la formación de ensamblados covalentes 3D y 2D (ver Figura). Las superestructuras obtenidas serán analizadas mediante técnicas específicas de la ciencia de materiales (AFM, TEM, SEM, XRD y TGA). Se investigará la viabilidad de los nanomateriales sintetizados para poder ser empleados como capas activas en aplicaciones fotovoltaicas o su interés en foto- y organocatálisis.

Publicaciones del grupo relacionadas con la línea de trabajo propuesta: *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2018**, *57*, 1001; *Chem. Commun.*, **2019**, *55*, 3223; *J. Am. Chem. Soc.* **2020**, *142*, 20324; *Angew. Chem. Int. Ed.* **2022**, *61*, e202211365; *Chem. Eur. J.* **2024**, *30*, e202302850; *Small Struct.* **2025**, *6*, 2400532.

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, la independencia en el trabajo, y la disposición para el aprendizaje de diferentes técnicas instrumentales. Se recomienda cursar la asignatura optativa de Nanociencia y Materiales Moleculares aunque no es imprescindible.

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. Acceso a los perfiles investigadores del grupo y de las directoras del proyecto: https://produccioncientifica.ucm.es/grupos/5292/detalle

MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGANICA
MENCIÓN DE MÁSTER EXCELENTE XUNTA DE GALICIA

PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2025-2026

DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE

Apellidos y nombre del director(es) del proyecto: Illescas Martínez, Beatriz M. / Cabrera González, Justo E.	
Cargo: Catedrática de Universidad / Profesor Ayudante Doctor	
Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto: Química Orgánica (Facultad de Química) / Química en Ciencias Farmacéuticas (Facultad de Farmacia)	
Teléfono directo **913944230**	**e-mail** **beti@ucm.es / justocab@ucm.es**

DATOS DEL PROYECTO

Título:

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

Nuestro grupo de investigación ha avanzado significativamente en el desarrollo de reacciones de derivatización de fullerenos, destacando su potencial para el diseño de nanoestructuras con alta solubilidad en agua, biocompatibilidad y con diversas aplicaciones en nanomedicina. Estas aplicaciones incluyen nanomateriales con propiedades como agentes antivirales, antioxidantes, agentes de contraste y plataformas para el transporte de fármacos.

En particular, en estos estudios hemos aplicado la estrategia de la multivalencia para desarrollar sistemas que permitan la síntesis de nanoestructuras con múltiples ligandos unidos a fullerenos, lo que resulta en una mejora significativa en su efecto biológico. Por ejemplo, hemos diseñado inhibidores antivirales basados en [60]fullereno que incorporan un número variable de carbohidratos (hasta 360 disacáridos), demostrando una notable capacidad para inhibir la infección causada por virus como el Ébola, Zika y Dengue. Recientemente, también hemos descrito derivados que combinan porfirinas y glicofullerenos capaces de inhibir con una alta eficacia la transinfección de SARS-CoV-2.

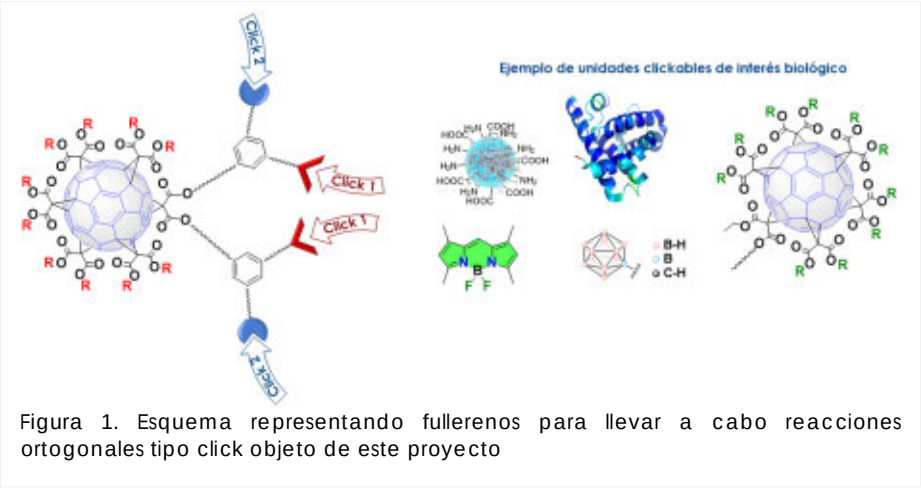


Figura 1. Esquema representando fullerenos para llevar a cabo reacciones ortogonales tipo click objeto de este proyecto

Dado el potencial que tienen estos derivados multivalentes, el objetivo de este trabajo es desarrollar plataformas ortogonalmente funcionalizadas basadas en [60]fullereno, que permitan la incorporación selectiva de unidades funcionales mediante estrategias de química click (Figura 1). En particular, se propone la obtención de derivados hetero-multivalentes que combinen funciones complementarias de interés biológico. Entre las funcionalidades a incorporar se incluyen marcadores fluorescentes para el seguimiento de procesos de internalización celular, así como agentes terapéuticos ricos en boro, con potencial aplicación en terapia dirigida contra el cáncer (p. ej., terapia de captura de neutrones por boro, BNCT).

La síntesis de estos sistemas se llevará a cabo mediante reacciones clave en química de fullerenos, como la ciclopropanación de Bingel–Hirsch, complementadas con metodologías bioortogonales de química click. Los productos obtenidos se purificarán mediante técnicas estándar como cromatografía en columna, cromatografía por exclusión de tamaño o HPLC, y se caracterizarán exhaustivamente mediante técnicas espectroscópicas (RMN, FTIR, UV-Vis), espectrometría de masas, y otras técnicas más propias del área de materiales (DLS, TEM, SEM, XPS...).
Finalmente, los compuestos seleccionados serán evaluados en ensayos biológicos, en colaboración con grupos expertos en virología y biomedicina, con el fin de explorar su potencial terapéutico y capacidad de interacción con sistemas celulares.

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, 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) C_{60}-based Multivalent Glycoporphyrins Inhibit SARS-CoV-2 Specific Interaction with the DC-SIGN Transmembrane Receptor. *Small* 2024, 20, 2307045. (DOI: 10.1002/smll.202307045)
b) Topological and Multivalent Effects in Glycofullerene Oligomers as EBOLA Virus Inhibitors. *Int. J. Mol. Sci.* 2022, *23, 5083.*
c) Synthesis of Highly Efficient Multivalent Disaccharide/[60]Fullerene Nanoballs for Emergent Viruses, *J. Am. Chem. Soc.* 2019, *141*, 15403–15412.

MASTERQO
MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGANICA
MENCIÓN DE MÁSTER EXCELENTE XUNTA DE GALICIA

UAM Universidad Autónoma de Madrid

UNIVERSIDAD COMPLUTENSE MADRID

USC UNIVERSIDADE DE SANTIAGO DE COMPOSTELA

XUNTA DE GALICIA

PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2025-2026

DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE

Apellidos y nombre del director(es) del proyecto: Herranz Astudillo, M. Ángeles/Illescas Martínez, Beatriz	
Cargo: Catedrática de Universidad / Catedrática de Universidad	
Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto: Química Orgánica, Facultad de Ciencias Químicas, UCM	
Teléfono directo 913944223/913944230	**e-mail** maherran@ucm.es /beti@ucm.es

DATOS DEL PROYECTO

Título: Diseño de nanoestructuras multivalentes basadas en BODIPYs y carbohidratos para aplicaciones en bioimagen y reconocimiento molecular

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

La modificación de las propiedades fisicoquímicas de diferentes nanoestructuras de carbono, como el [60]fullereno, los nanotubos de carbono o nanopartículas de carbono (carbon dots), mediante el diseño de estrategias de funcionalización versátiles, ha abierto nuevas oportunidades para su aplicación en el ámbito de la nanomedicina. En particular, los glicofullerenos —derivados obtenidos por unión covalente de carbohidratos al esqueleto del fullereno— presentan una excelente solubilidad en medios acuosos y buena biocompatibilidad, lo que los convierte en candidatos prometedores para aplicaciones como agentes antivirales, antioxidantes, agentes de contraste o plataformas para la liberación dirigida de fármacos.

Resultados previos de nuestro grupo de investigación han demostrado que los glicofullerenos pueden interaccionar de forma eficiente y selectiva con diversas lectinas, dependiendo de la naturaleza y presentación espacial de los carbohidratos anclados al [60]fullereno. Para maximizar estas interacciones, hemos desarrollado nanoestructuras empleando el principio de multivalencia, mediante el cual se incorporan múltiples ligandos sobre la superficie del fullereno, generando un efecto cooperativo que potencia su actividad biológica. Un ejemplo destacado es el desarrollo de inhibidores antivirales multivalentes basados en [60]fullereno funcionalizados con hasta 360 disacáridos, que han mostrado una elevada capacidad de inhibición frente a virus como Ébola, Zika y Dengue.

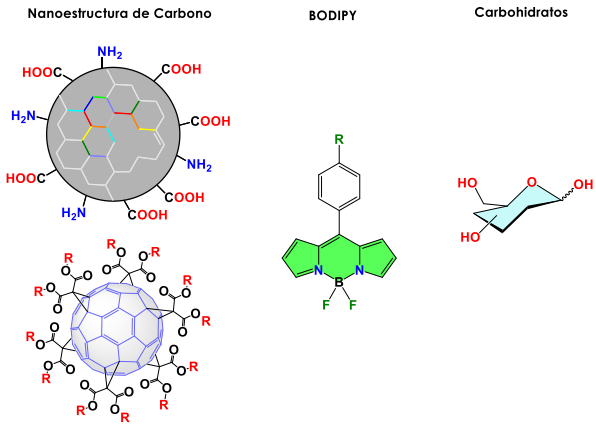


Figura 1. *Representación esquemática de los sistemas objeto del presente proyecto.*

En los últimos años ha crecido notablemente el interés por desarrollar métodos capaces de generar señales sensibles y fácilmente detectables para el análisis de interacciones entre carbohidratos y sus receptores. Entre estas estrategias, el uso de marcadores fluorescentes se ha consolidado como una herramienta ampliamente aceptada. Sin embargo, el etiquetado fluorescente de carbohidratos ha sido mucho menos explorado en comparación con el de proteínas o ácidos nucleicos. Dentro del amplio repertorio de colorantes fluorescentes disponibles, los derivados de BODIPY (4,4-difluoro-4-bora-3a,4a-diaza-s-indaceno) han adquirido una posición destacada por su versatilidad y excelentes propiedades ópticas.

En este proyecto se pretende investigar la combinación de nanoformas de carbono, como los fullerenos o los carbon dots, con fluoróforos de tipo BODIPY y carbohidratos, que representa una estrategia innovadora y altamente prometedora para el desarrollo de sistemas funcionales en nanobiotecnología. Las nanoestructuras de carbono ofrecen plataformas versátiles, con superficies ricas en sitios de funcionalización, alta estabilidad química y propiedades electrónicas únicas. Por su parte, los BODIPYs aportan excelentes características fotofísicas —como alto rendimiento cuántico, buena estabilidad fotoquímica y emisiones nítidas— que los convierten en herramientas ideales para bioimagen y detección. La introducción de carbohidratos permite dotar a estos sistemas de biocompatibilidad y capacidad de reconocimiento molecular específico frente a lectinas o receptores celulares, facilitando la internalización selectiva en células diana. La integración de estos tres componentes en una única nanoarquitectura multivalente abre nuevas vías para el diseño de materiales con aplicaciones en diagnóstico, terapia dirigida, biosensores y estudios de interacciones biomoleculares en entornos biológicos complejos.

Para realizar este trabajo, se llevará a cabo la síntesis de los derivados de BODIPY funcionalizados con carbohidratos y un punto de anclaje mediante química click. Estos derivados serán posteriormente unidos a las nanoestructuras de carbono mediante reacciones de tipo click-chemistry. Los productos obtenidos se purificarán adecuadamente mediante diversas técnicas (cromatografía, exclusión de tamaño, etc.), y se caracterizarán mediante RMN, FTIR, espectrometría de masas, etc. Además, se estudiarán los espectros electrónicos de absorción y emisión, y se emplearán otras técnicas más propias del área de materiales (TEM, SEM, XPS, DLS...).

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

El estudiante deberá tener conocimientos de síntesis, purificación y determinación estructural de compuestos orgánicos. Es importante la capacidad de trabajo en equipo, la independencia en el trabajo, y la disposición para el aprendizaje de diferentes técnicas instrumentales. Se recomienda cursar la asignatura optativa de Materiales Orgánicos y Nanociencia, aunque no es imprescindible.

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

El proyecto está dirigido por Mª Ángeles Herranz (https://orcid.org/0000-0001-9155-134X) y Beatriz Illescas (https://orcid.org/0000-0002-4727-8291), 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, CV, 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 de interés biológico.

Selección de publicaciones relacionadas con el proyecto:

a) C_{60}-based Multivalent Glycoporphyrins Inhibit SARS-CoV-2 Specific Interaction with the DC-SIGN Transmembrane Receptor. *Small*, 2024, 2307045.
b) Synthesis of Highly Efficient Multivalent Disaccharide/[60]Fullerene Nanoballs for Emergent Viruses, *J. Am. Chem. Soc.* 2019, *141*, 15403–15412.
c) Bodipy-carbohydrate systems: synthesis and bio-applications, *Org. Biomol. Chem.*, 2022, *20*, 2742-2763.
d) Novel hybrids based on graphene quantum dots covalently linked to glycol corroles for multiphoton bioimaging, *Carbon*, 2020, *166*, 164-174.

PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2025-2026

DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE

Apellidos y nombre del director(es) del proyecto: BEATRIZ LORA MAROTO	
Cargo: PROFESORA TITULAR DE UNIVERSIDAD	
Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto: Dpto. de Química Orgánica (UCM). Facultad de Ciencias Químicas, Ciudad Universitaria	
Teléfono directo 913944716	**e-mail** belora@ucm.es

DATOS DEL PROYECTO

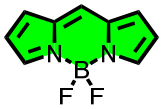
Título: Exploración de nuevas metodologías para la funcionalización dirigida de BODIPYs

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

Este Trabajo Fin de Máster se desarrollará en el ámbito de la fotónica, particularmente en el desarrollo sintético y caracterización de colorantes orgánicos. La fotónica, disciplina que estudia la generación, detección y manipulación de la luz, ha demostrado ser esencial en numerosos sectores estratégicos. Entre ellos destacan la medicina (diagnóstico por imagen, terapia fotodinámica, cirugía láser), las tecnologías de la información y las comunicaciones (dispositivos OLED, transmisión por fibra óptica), el medioambiente (sensores ópticos para contaminantes) y la seguridad (codificación óptica, sistemas de trazabilidad, etc.). Por su potencial transformador, la Unión Europea la considera una de las tecnologías clave (*key enabling technologies*) para su desarrollo económico y social.

El avance en el ámbito de la fotónica orgánica exige el diseño de nuevos sistemas ópticamente activos, capaces de exhibir propiedades mejoradas o completamente nuevas, que abran la puerta a aplicaciones actualmente inaccesibles, o supongan una mejora en las actuales. Para lograrlo, es esencial contar con plataformas moleculares que no solo presenten un buen rendimiento fotónico, sino que también puedan adaptarse químicamente a los requisitos de cada aplicación. En este sentido, los cromóforos BODIPY (*boron dipyrromethene*) destacan por su notable estabilidad, su excelente comportamiento fotónico, su síntesis accesible y, particularmente, por la gran versatilidad que ofrecen en cuanto a su modificación estructural. La posibilidad de derivatizar la estructura del BODIPY de forma controlada y dirigida permite afinar sus propiedades y orientarlas hacia usos concretos, desde sensores ópticos hasta emisores para dispositivos. Por ello, el desarrollo de metodologías eficientes y directas de funcionalización no solo amplía su campo de aplicación, sino que constituye un paso indispensable para convertir estos sistemas en materiales fotónicos a medida.

El **objetivo** del presente proyecto es la **exploración de metodologías innovadoras para la funcionalización racional de BODIPYs de manera eficiente y versátil**. La experiencia consolidada del grupo de investigación y de la directora del trabajo en síntesis orgánica y química de BODIPYs respalda la viabilidad del proyecto y garantiza un entorno formativo y científico de alta calidad.



BODIPY
(boron dipyrromethene)

Las tareas a realizar por la/el estudiante serán**:**

- *Síntesis de BODIPYs.*
- *Aplicación de metodologías para su funcionalización dirigida.*
- *Optimización de metodologías sintéticas*
- *Aislamiento, purificación y caracterización estructural de los BODIPYs obtenidos.*

Colorantes Orgánicos para Materiales Fotónicos
UNIVERSIDAD COMPLUTENSE MADRID

- Caracterización fotofísica de los nuevos BODIPYs obtenidos.
- Búsqueda y análisis de información científica.
- Elaboración de informes.

Capacidades y conocimientos recomendables que debe tener el estudiante para la realización de este proyecto
Interés en realizar un proyecto multidisciplinar en Química Orgánica y Fotónica.
Conocimientos básicos en síntesis orgánica y caracterización espectroscópica.

Indíquese cualquier otra aclaración que se considere que pueda ayudar a los estudiantes en la elección del TFM
La directora del TFM pertenece al grupo de investigación UCM de Colorantes Orgánicos para Materiales Fotónicos, (https://www.ucm.es/colorganic/), cuya investigación se encuentra enfocada en el desarrollo sintético de moléculas activas para aplicaciones fotónicas y biofotónicas. El grupo forma parte de un consorcio multidisciplinar, donde colabora con reconocidos expertos en fotónica hacia la consecución de objetivos comunes de investigación.

MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGANICA
MENCIÓN DE MÁSTER EXCELENTE XUNTA DE GALICIA

PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2025-2026

DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE

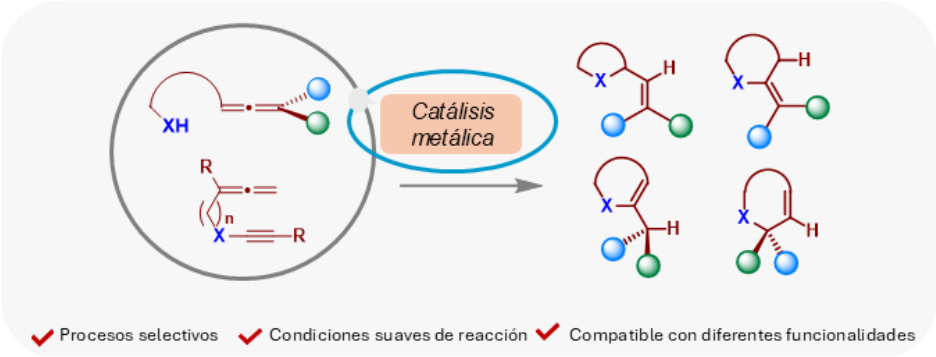
Apellidos y nombre del director(es) del proyecto: Luna Costales, Amparo y Almendros Requena, Pedro	
Cargo: Profesora Titular de Universidad y Profesor de Investigación de Organismos Públicos de Investigación	
Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto: Química Orgánica, Facultad Ciencias de Químicas, Universidad Complutense de Madrid	
Teléfono directo 91 394 4205/91 380 9621	**e-mail** alunac@ucm.es; palmendros@iqog.csic.es

DATOS DEL PROYECTO

Título: Nueva metodología sintética basada en sistemas insaturados utilizando catálisis metálica

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

La química de alenos ha experimentado un notable desarrollo en los últimos años. Esto es debido a que son importantes intermedios en Síntesis Orgánica, así como a la interesante reactividad y selectividad que presentan como materiales de partida en la preparación de estructuras complejas, en particular, utilizando catalizadores metálicos muy activos y estables como oro, plata, cobre, rodio, paladio y platino. La reacción de ciclación de alenos que contienen un centro nucleófilo en su estructura ha dado lugar a anillos de diferentes tamaños, con buen control de la regio- y la estereoselectividad. Este tipo de reacciones presentan la ventaja de que en un gran número de casos el grupo aleno es más reactivo que cualquier otra funcionalidad insaturada. Además, uno de los dobles enlaces del aleno permanece en el producto final, lo que supone un punto reactivo por el que continuar la síntesis en caso necesario. Por otra parte, la catálisis fotoredox se ha posicionado como una valiosa herramienta para activar pequeñas moléculas orgánicas. Las reacciones fotoredox de ciclación/arilación en compuestos insaturados catalizadas por metales puede generar de forma selectiva productos de ciclación con buenos rendimientos en condiciones suaves de reacción. En el trabajo experimental se desarrollará una metodología eficiente de ciclación de sistemas insaturados con sustituyentes de diferentes características estereoelectrónicas, parámetros importantes para el diseño de nuevos productos con potencial actividad farmacológica.



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 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

MASTERQO
MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGANICA
MENCIÓN DE MÁSTER EXCELENTE XUNTA DE GALICIA

UAM Universidad Autónoma de Madrid

UNIVERSIDAD COMPLUTENSE MADRID

USC UNIVERSIDADE DE SANTIAGO DE COMPOSTELA

XUNTA DE GALICIA

PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2025-2026

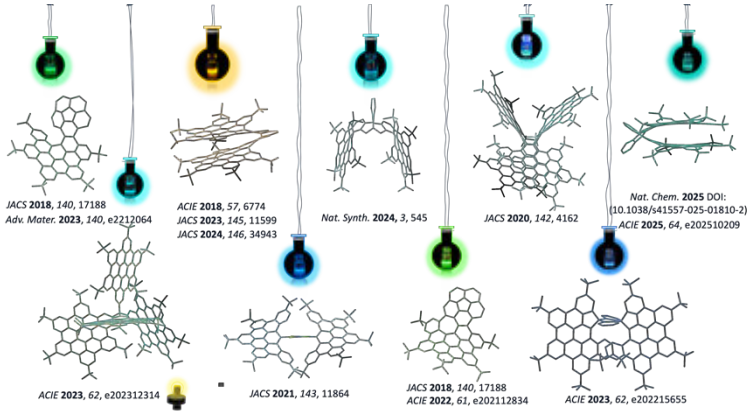
DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE

Apellidos y nombre del director(es) del proyecto: Nazario Martín León y Jesús Manuel Fernández García	
Cargo: Catedrático e investigador contratado	
Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto: Química Orgánica, UCM	
Teléfono directo 91 394 4227	**e-mail** nazmar@ucm.es **y** jesusmaf@ucm.es

DATOS DEL PROYECTO

Título: Síntesis de nanografenos moleculares y estudio de sus propiedades optoelectrónicas

Breve descripción de los objetivos, contenido del proyecto y tareas a realizar 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 (NGs), se crea una separación entre las bandas de conducción y de valencia obteniéndose estructuras semiconductoras con nuevas propiedades optoelectrónicas, lo que abre un abanico de nuevas aplicaciones para los materiales grafénicos, en campos como la fotovoltáica, OLEDs o almacenamiento de energía.



La síntesis orgánica juega 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. Esta aproximación 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 orgánica clásica. 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, quiralidad. Además, se procederá al estudio de su caracterización espectroscópica y estructural, así como 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 reconocimiento internacional, especialistas en algunas de estas metodologías.

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 para su aplicación 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.

PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2025-2026

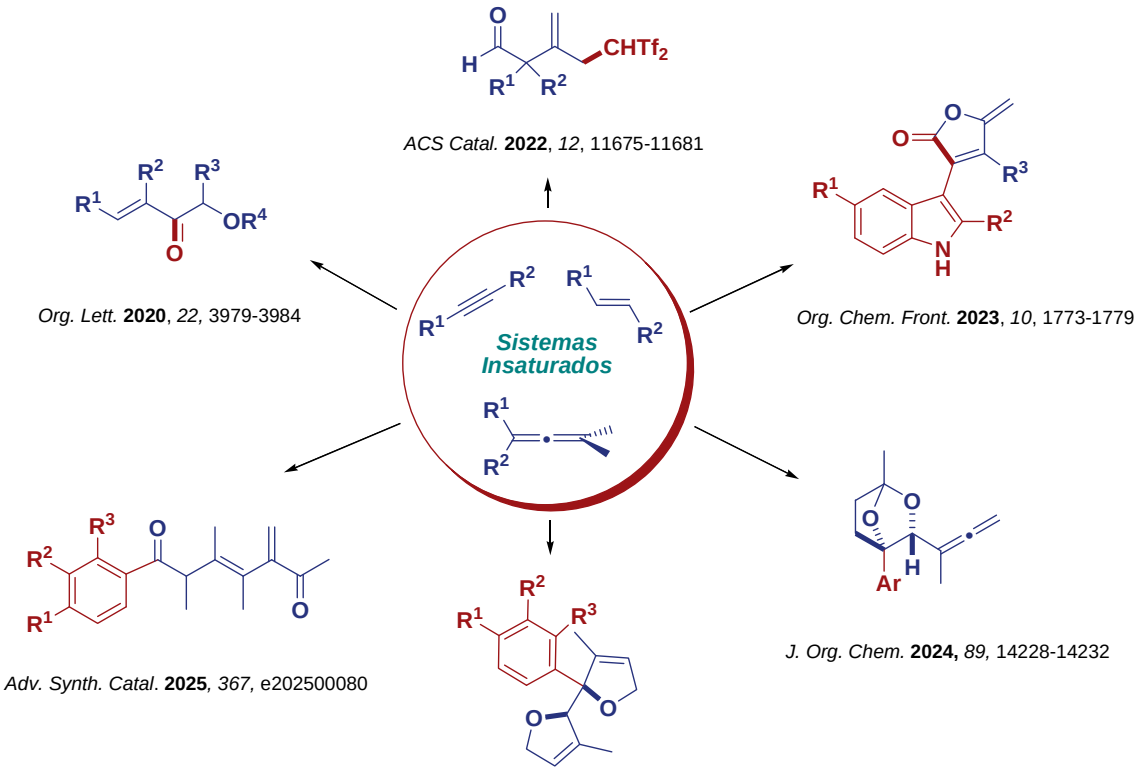
DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE

Apellidos y nombre del director(es) del proyecto: : MARTÍNEZ DEL CAMPO, TERESA	
Cargo: PROFESORA TITULAR UNIVERSIDAD	
Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto: QUÍMICA ORGÁNICA, FACULTAD CIENCIAS QUÍMICAS, UNIVERSIDAD COMPLUTENSE DE MADRID	
Teléfono directo: 913944270	**e-mail: teremart@ucm.es**

DATOS DEL PROYECTO

Título: "Nuevas metodologías sintéticas basadas en sistemas insaturados para la obtención de moléculas orgánicas relevantes"

Breve descripción de los objetivos, contenido del proyecto y tareas a realizar: En el presente trabajo se pretende como objetivo general la puesta a punto de procesos de funcionalización en alenos y otros sistemas insaturados, 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.



ACS Catal. **2022**, *12*, 11675-11681

Org. Lett. **2020**, *22*, 3979-3984

Org. Chem. Front. **2023**, *10*, 1773-1779

Adv. Synth. Catal. **2025**, *367*, e202500080

J. Org. Chem. **2024,** *89*, 14228-14232

J. Org. Chem. **2024,** *89*, 14228-14232

El plan de formación consistirá en dos etapas: en primer lugar, se llevará a cabo el análisis retrosintético de los 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 y/o propiedades físicas.

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
Para más información sobre la investigación llevada a cabo en nuestro grupo de trabajo (***Grupo de Química de Sistemas Insaturados y Heterociclos Bioactivos)*** véase nuestra web: https://www.ucm.es/beta-lactamas

MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGÁNICA

PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2024-2025

DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE

Apellidos y nombre del director(es) del proyecto: **Paloma Martínez Ruiz** **Diana Vilela garcía**	
Cargo: **Catedrática de Universidad** **Profesora Contratada Doctora**	
Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto: Departamento de Química Orgánica Facultad de CC Químicas UCM Avda Complutense s/n 28040-Madrid	
Teléfono directo **913944224**	**e-mail** palmarti@ucm.es, divilela@ucm.es

DATOS DEL PROYECTO

Título: **DISEÑO Y PREPARACIÓN DE SISTEMAS DE LIBERACIÓN CONTROLADA BASADOS EN NANOMATERIALES MESOPOROSOS FUNCIONALIZADOS CON PUERTAS MOLECULARES ESTÍMULO-DEPENDIENTES TRANSPORTADOS POR MICROMOTORES**
Breve descripción de los objetivos, contenido del proyecto y tareas a realizar **Se propone la preparación de nuevos micromotores mediante la integración de un elemento de propulsión nanoestructurado y un elemento de encapsulación con control enzimático, basado en nanopartículas Janus de sílice mesoporosa funcionalizadas con residuos de PEG en una de sus caras y mecanizadas con puertas moleculares dependientes de estímulos en la otra. Estos micromotores se validarán para la entrega autónoma y bajo demanda de fármacos antitumorales.** **El trabajo propuesto es de carácter multidisciplinar, y contempla todas las fases del proceso, incluyendo la búsqueda bibliográfica, la síntesis y caracterización de los ligandos orgánicos estímulo-dependientes, preparación de micromotores, ensamblaje de los sistemas de liberación controlada y los micromotores y las medidas de funcionalidad de los mismos.**
Capacidades y conocimientos recomendables que debe tener el estudiante para la realización de este proyecto **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 **El proyecto es de carácter multidisciplinar, abarcando las áreas de Nanotecnología, Biotecnología y Química Orgánica**

MASTERQO
MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGÁNICA

PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2024-2025

DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE

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

DATOS DEL PROYECTO

Título: **DESARROLLO DE ENSAMBLAJES MOLECULARES PARA LA PREPARACION DE SISTEMAS DE LIBERACIÓN CONTROLADA BASADOS EN NANOMATERIALES MESOPOROSOS**
Breve descripción de los objetivos, contenido del proyecto y tareas a realizar **Se llevará a cabo la preparación, caracterización y funcionamiento de nanomáquinas dotadas de puertas (bio)moleculares sensibles a estímulos externos, capaces de liberar selectivamente diferentes reactivos encapsulados y/o realizar tareas de comportamiento cooperativo. El diseño de los dispositivos se basa en el ensamblaje de diferentes estructuras supramoleculares sobre la superficie de nanopartículas mesoporosas, capaces de bloquear la salida de fármacos o moléculas de interés alojados en el interior de los poros, y liberarlos a demanda.** **El proyecto es de carácter multidisciplinar, y contempla todas las fases del proceso, incluyendo la búsqueda bibliográfica, síntesis y caracterización de los ligandos orgánicos estímulo-dependientes y de las nanomáquinas, y medidas de funcionalidad de los nanodispositivos.**
Capacidades y conocimientos recomendables que debe tener el estudiante para la realización de este proyecto **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 **El proyecto es de carácter multidisciplinar, abarcando las áreas de Nanotecnología, Biotecnología y Química Orgánica**

MASTERQO
MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGANICA
MENCIÓN DE MÁSTER EXCELENTE XUNTA DE GALICIA

UAM Universidad Autónoma de Madrid
UNIVERSIDAD COMPLUTENSE MADRID
USC UNIVERSIDADE DE SANTIAGO DE COMPOSTELA
XUNTA DE GALICIA

PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2025-2026

DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE

Apellidos y nombre del director(es) del proyecto: SANTIAGO DE LA MOYA CERERO, FLORENCIO MORENO JIMÉNEZ	
Cargo: CATEDRÁTICO DE UNIVERSIDAD (SMC) CATEDRÁTICO DE ESCUELA UNIVERSITARIA (FMJ)	
Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto: QUÍMICA ORGÁNICA (UCM)	
Teléfono directo 913945090 (SMC) 913945244 (FMJ)	**e-mail** santmoya@ucm.es (SMC) floren@ucm.es (FMJ)

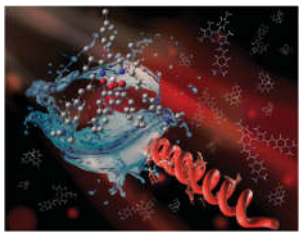
DATOS DEL PROYECTO

Título: Exploración de BODIPYs como plataformas emisoras de luz quiral en medios no convencionales

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

Este Trabajo Fin de Máster se enmarca en el ámbito de la fotónica orgánica, y más específicamente en el estudio de materiales orgánicos emisores de luz quiral (luz circularmente polarizada, CP), y de fácil procesado y aplicabilidad en entornos no convencionales para estos materiales, como por ejemplo medios acuosos.

En este contexto, el proyecto tiene como **objetivo** el **desarrollo de nuevas moléculas emisores de luz CP de naturaleza orgánica, concretamente BODIPYs**, caracterizadas por síntesis sencilla de forma enantiopura, alto brillo en emisión CP y alta solubilidad en agua u otros medios distintos de los disolventes orgánicos convencionales. Para ello se emplearán bloques de construcción de fácil acceso —preferiblemente comerciales— y colorantes BODIPY fácilmente modulables. El diseño de estos emisores estará orientado específicamente a potenciar su actividad quiróptica en medios no convencionales, lo cual ampliará su uso en aplicaciones avanzadas o emergentes específicas basadas en emisión de luz CP. Nuestro grupo desarrolla una línea de investigación consolidada en el diseño y síntesis de moléculas orgánicas con alta capacidad de emitir luz CP, contando con amplia experiencia en el desarrollo de BODIPYs para aplicaciones fotónicas avanzadas.



Colorantes Orgánicos para Materiales Fotónicos
UNIVERSIDAD COMPLUTENSE MADRID

Las tareas a realizar por el estudiante serán**:**

- *Síntesis orgánica de colorantes quirales.*
- *Aislamiento, purificación y caracterización estructural de dichos colorantes.*
- *Caracterización fotofísica y quiróptica.*
- *Establecimiento de correlaciones estructura-actividad quiróptica.*
- *Búsqueda y análisis de información científica-tecnológica.*
- *Elaboración de informes.*

Capacidades y conocimientos recomendables que debe tener el estudiante para la realización de este proyecto
Interés en realizar un proyecto multidisciplinar en Química Orgánica y materiales fotónicos.

Indíquese cualquier otra aclaración que se considere que pueda ayudar a los estudiantes en la elección del TFM
Los tutores del TFM pertenecen al grupo de investigación UCM de Colorantes Orgánicos para Materiales Fotónicos, (https://www.ucm.es/colorganic/), cuya investigación se encuentra enfocada en el desarrollo sintético de moléculas activas para aplicaciones fotónicas y biofotónicas. El grupo forma parte de un consorcio multidisciplinar, donde colabora con reconocidos expertos internacionales en fotofísica, quiróptica y foto-(bio)medicina.

PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2025-2026

DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE

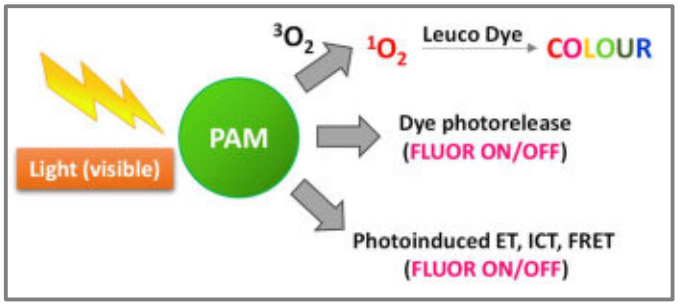
Apellidos y nombre del director(es) del proyecto: Orellana Moraleda, Guillermo / Descalzo López, Ana Belén	
Cargo: Catedrático de Universidad (Director del Grupo de Investigación) / Profesora Titular	
Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto: Dpto. Química Orgánica, Facultad de Ciencias Químicas, UCM. Av. Complutense s/n. 28040 - Madrid	
Teléfono directo 91 394 4220 / 5030	**e-mail** gorellana@ucm.es / abdescal@ucm.es

DATOS DEL PROYECTO

Título: Moléculas fotoactivas para aplicaciones sensoras

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

El diseño y síntesis de nuevas *moléculas fotoactivas (PAMs)* capaces de reaccionar a un estímulo luminoso (preferentemente visible) abre la posibilidad de multitud de aplicaciones en campos como la medicina (nuevas terapias fotodinámicas), la ciencia de materiales (materiales fotoactivos con propiedades mejoradas), las energías renovables (células fotovoltaicas) o la química analítica (diseño de sensores químicos ópticos), entre otros. La "ingeniería molecular" permite obtener, por ejemplo, fotosensibilizadores para la generación selectiva y eficaz de especies reactivas de oxígeno como $^1O_2$, moléculas para liberación (foto)controlada mediante una reacción fotoquímica, o el control de procesos fotoinducidos que pueden aplicarse para señalización fluorescente (transferencia electrónica, ET; transferencia de carga intramolecular, ICT, o transferencia de energía resonante Föster, FRET). En este contexto, el proyecto persigue el diseño, síntesis y caracterización fotoquímica de dichas moléculas que pueden ser tipo boro-dipirrometeno BODIPY, complejos de Ru(II) luminiscentes, cianinas, triarilmetanos o cumarinas, entre otros. El proyecto comprenderá la síntesis de las moléculas objetivo, su purificación y caracterización estructural, así como su estudio fotofísico y fotoquímico. Si el tiempo y los resultados lo permiten, se explorará una aplicación final para la detección de analitos de interés como son algunas micotoxinas consideradas "preocupantes" por la UE, que se encuentran como contaminantes en ciertos alimentos de consumo frecuente.



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

Síntesis orgánica y caracterización espectroscópica de nuevas moléculas.

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

El proyecto se desarrollará en el Grupo UCM de Sensores Químicos Ópticos y Fotoquímica Aplicada (GSOLFA, https://www.gsolfa.info/). Se trata de un trabajo con perfil de Química Orgánica (síntesis de colorantes) y Fotoquímica. El estudiante recibirá una formación multidisciplinar: síntesis orgánica, métodos de purificación, caracterización estructural por espectroscopías de RMN y FTIR y espectrometría de masas y caracterización espectroscópica (absorción UV-Vis y fluorometría) y fotoquímica. Además de investigación básica, el proyecto posee un marcado carácter *aplicado* (aplicaciones sensoras, especialmente en el campo de micotoxinas alimentarias.

MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGANICA
MENCIÓN DE MÁSTER EXCELENTE XUNTA DE GALICIA

PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2025-2026

DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE

Apellidos y nombre del director(es) del proyecto: Ortega Gutiérrez, Silvia / Vázquez Villa, Henar	
Cargo: Catedrática / Profesora Contratada Doctora	
Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto: Dpto. de Química Orgánica, UCM – Laboratorio de Química Médica	
Teléfono directo 913944314 / 913945244	**Teléfono directo** 913944314 / 913945244

DATOS DEL PROYECTO

Título: Desarrollo de PROTACs basados en cannabidiol
Breve descripción de los objetivos, contenido del proyecto y tareas a realizar Proyecto dirigido a la síntesis de nuevas moléculas bifuncionales inductoras de degradación (PROTACs, *proteolysis-targeting chimeras*) en el marco de un programa de química biológica con el objetivo de identificar las dianas del producto natural cannabidiol (CBD). El proyecto implicará el aprendizaje y el desarrollo de diferentes metodologías de síntesis orgánica, el aislamiento, la purificación y la caracterización estructural (RMN, IR, HPLC-MS…) así como la evaluación biológica de los compuestos sintetizados en los modelos celulares adecuados.
Capacidades y conocimientos recomendables que debe tener el estudiante para la realización de este proyecto Técnicas de síntesis, purificación y elucidación estructural de compuestos orgánicos. Conocimientos de química orgánica tanto teóricos como prácticos.
Indíquese cualquier otra aclaración que se considere que pueda ayudar a los estudiantes en la elección del TFM El proyecto permitirá adquirir una formación en el área de Química Médica en un entorno multidisciplinar.

PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2025-2026

DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE

Apellidos y nombre del director(es) del proyecto: Silvia Roscales García	
Cargo: Profesora Permanente Laboral	
Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto: Departamento de Química Orgánica / Instituto pluridisciplinar (UCM)	
Teléfono directo 913943266	**e-mail** silviaroscales@ucm.es

DATOS DEL PROYECTO

Título: Síntesis de compuestos orgánicos con aplicaciones farmacológicas
Breve descripción de los objetivos, contenido del proyecto y tareas a realizar El proyecto consistirá en la síntesis de nuevos compuestos con potencial aplicación farmacológica. Las actividades incluirán tareas de síntesis orgánica, purificación de productos y caracterización estructural mediante técnicas espectroscópicas (como RMN, IR) y espectrometría de masas.
Capacidades y conocimientos recomendables que debe tener el estudiante para la realización de este proyecto Conocimientos de síntesis orgánica y elucidación estructural.
Indíquese cualquier otra aclaración que se considere que pueda ayudar a los estudiantes en la elección del TFM

MASTERQO
MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGANICA
MENCIÓN DE MÁSTER EXCELENTE XUNTA DE GALICIA

UAM Universidad Autónoma de Madrid

UNIVERSIDAD COMPLUTENSE MADRID

USC UNIVERSIDADE DE SANTIAGO DE COMPOSTELA

XUNTA DE GALICIA

PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2025-2026

DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE

Apellidos y nombre del director(es) del proyecto: Sánchez Martín, Luis	
Cargo: Catedrático de Universidad	
Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto: Química Orgánica	
Teléfono directo: 91 3945141	**e-mail: lusamar@ucm.es**

DATOS DEL PROYECTO

Título: Síntesis de derivados luminiscentes de PDI en forma de L. Estudio de la capacidad de autoensamblaje y propiedades emisoras y quirópticas

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 electroactivas, altamente emisoras de luz y dotadas con grupos funcionales adecuados para formar polímeros supramoleculares helicoidales (compuesto **1** en Figura 1a).[1,2] 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. Una parte muy relevante del proyecto será el estudio de la quiralidad de dichas estructuras supramoleculares. La helicidad de los polímeros supramoleculares formados y su capacidad emisiva será utilizada para evaluar sus potenciales propiedades como materiales emisores de luz circularmente polarizada (CPL, Figura 1b).[3] Esta propiedad puede ser utilizada en distintas aplicaciones como es el caso de síntesis asimétrica o dispositivos luminiscentes.

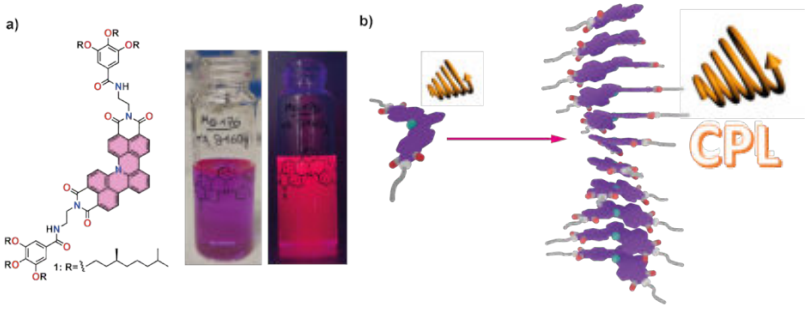


Figura 1. (a) Estructura química de la perilendiimida **1** y de las disoluciones de dicho compuesto en metilciclohexano sin (centro) y bajo irradiación a λ = 365 nm (izquierda); (b) Representación esquemática de un proceso de polimerización supramolecular para generar estructuras helicoidales

1.- (a) F. García, R. Gómez, L. Sánchez, *Chem. Soc. Rev.* **2023***, 52,* 7524; (b) X. Tian, K. Shoyama, F. Würthner, *Chem. Sci*., **2023**, 14, 284.
2.- R. Rodríguez, C. Naranjo, A. Kumar, P. Matozzo, T. Kumar Das, Q. Zhu, N. Vanthuyne, R. Gómez, R. Naaman, L. Sánchez, J. Crassous, *J. Am. Chem. Soc.* **2022**, *144*, 7709
3.- L. López-Gandul, C. Naranjo, C. Sánchez, R. Rodríguez, R. Gómez, J. Crassous, L. Sánchez, *Chem. Sci*. **2022,** *13*, 11577.

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).

MASTERQO
MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGANICA
MENCIÓN DE MÁSTER EXCELENTE XUNTA DE GALICIA

UAM Universidad Autónoma de Madrid
UNIVERSIDAD COMPLUTENSE MADRID
USC UNIVERSIDADE DE SANTIAGO DE COMPOSTELA
XUNTA DE GALICIA

PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2025-2026

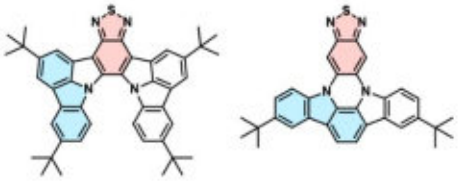
DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE

Apellidos y nombre del director(es) del proyecto: Santos Barahona, José Manuel	
Cargo: Profesor Contratado Doctor	
Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto: Dpto. de Química Orgánica, Facultad CC. Químicas de la UCM, Avenida Complutense s/n, 28040 Madrid	
Teléfono directo 5244	**e-mail** jsantosb@ucm.es

DATOS DEL PROYECTO

Título: Síntesis de materiales con fluorescencia retardada activada térmicamente para dispositivos OLED

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



Desde la aparición en 2012 de los primeros dispositivos OLED que empleaban moléculas emisoras capaces de emitir mediante fluorescencia retardada activada térmicamente (TADF), se ha producido un gran desarrollo en el campo de la luminiscencia. El TADF permite comunicar de forma eficiente los estados singlete y triplete, lo que abre la vía a una gran variedad de aplicaciones, que van desde los OLED, a los sensores biológicos luminiscentes, pasando por la fotocatálisis y otros campos. Por lo general, para obtener una molécula que presente TADF es necesario combinar una molécula aceptora de electrones con otra dadora, en una disposición geométrica que provoque que HOMO y LUMO se encuentren segregados espacialmente el uno del otro. En este proyecto, se van a sintetizar diferentes moléculas que combinan un aceptor electrónico como el benzotiadiazol (rojo) con derivados de la molécula de carbazol (azul) y se va a estudiar su fotoluminescencia.

Revisiones de interés:

1. Martin R. Bryce *et al. Nat. Rev. Mater.* **2018**, *3*, 18020
2. Eli Zysman-Colman *et al. Chem. Rev.* **2024**, *124*, 13736–14110

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

Se precisan los conocimientos de grado en Química, con interés por la síntesis orgánica. Es importante la capacidad de trabajo en equipo y la disposición para el aprendizaje de diferentes técnicas instrumentales, así como la capacidad de leer literatura científica en inglés.

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

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 ORGANICA
MENCIÓN DE MÁSTER EXCELENTE XUNTA DE GALICIA

UAM Universidad Autónoma de Madrid
UNIVERSIDAD COMPLUTENSE MADRID
USC UNIVERSIDADE DE SANTIAGO DE COMPOSTELA
XUNTA DE GALICIA

PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2025-2026

DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE

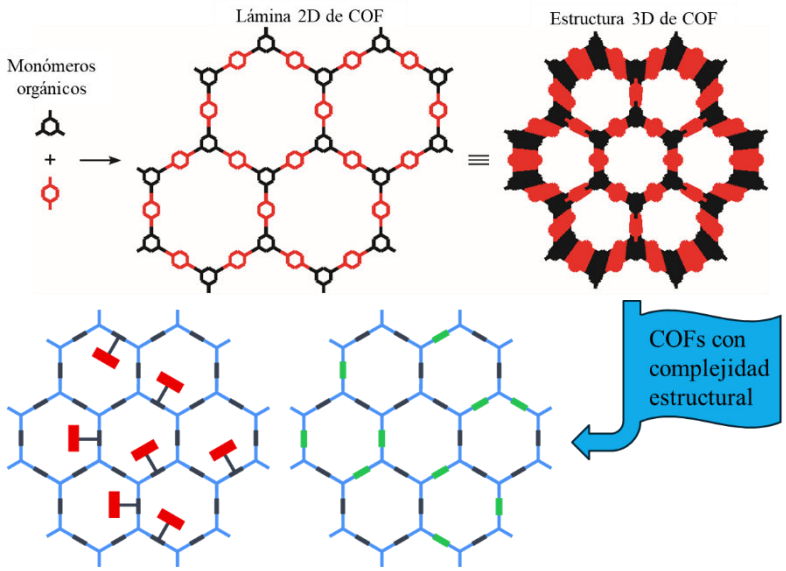
Apellidos y nombre del director(es) del proyecto: JOSÉ LUIS SEGURA CASTEDO SERGIO ROYUELA COLLADO	
Cargo: JLSC: Catedrático de Universidad SRC: Profesor Ayudante Doctor	
Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto: Departamento de Química Orgánica. Facultad de Química. Universidad Complutense de Madrid. 28040-Madrid	
Teléfono directo JLSC: 913945142 SRC: 913945143	**e-mail** JLSC: segura@ucm.es SRC: s.royuela@ucm.es

DATOS DEL PROYECTO

Título: Química Reticular Orgánica: Nuevas Rutas Sintéticas para Materiales Funcionales

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

La Química Reticular es el campo de la Química centrado en el diseño y la síntesis de materiales altamente ordenados, los cuales se obtienen por la unión controlada de sistemas moleculares. Este proyecto se enfoca específicamente en las redes orgánicas covalentes (*covalent organic frameworks*, COFs), una familia de materiales puramente orgánicos que presentan estructuras cristalinas porosas bi- y tridimensionales y que se sintetizan mediante la unión covalente de subunidades moleculares. De esta forma se generan estructuras abiertas con tamaños de poros típicamente entre 1 y 5 nanómetros, orden a largo alcance, y un control predecible de la composición, topología y porosidad de la red que los diferencia de otros polímeros covalentes clásicos.



El presente trabajo se enmarca en la línea de investigación del grupo centrada en aumentar la complejidad estructural de estos materiales, tanto en la estructura química de los monómeros orgánicos como en su combinación para dar lugar a series de COFs isorreticulares. Como objetivos principales se plantea, en primer lugar, la utilización de métodos de síntesis orgánica para la obtención de nuevas moléculas, específicamente diseñadas, que posean las funcionalidades químicas y geométricas necesarias para dirigir el ensamblaje reticular, incorporando diferentes combinaciones de halógenos y otros grupos funcionales. En segundo lugar, se emplearán estas moléculas como bloques de construcción para generar redes orgánicas covalentes porosas, utilizando para ello tanto métodos de síntesis convencionales como no convencionales, como son la síntesis solvotermal y la sonoquímica. Los materiales obtenidos se estudiarán mediante técnicas de caracterización estructural general (RMN, FTIR) así como técnicas específicas de materiales reticulares (DRX, BET), entre otras.

Si se obtienen materiales con propiedades prometedoras, se estudiarán sus posibles aplicaciones en colaboración con grupos de investigación nacionales e internacionales con los que se mantiene una estrecha colaboración, contribuyendo así al desarrollo de nuevos materiales funcionales con potencial impacto en tecnologías energéticas y medioambientales. Este enfoque permite desarrollar investigación de interés tanto desde el punto de vista académico como desde el punto de vista de las aplicaciones prácticas.

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

Formación en síntesis orgánica y 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

El proyecto se desarrollará en el Grupo de materiales orgánicos macromoleculares y heterocíclicos (**www.ucm.es/macromater**) que desarrolla su investigación en la frontera entre la síntesis orgánica, la química reticular y el desarrollo de materiales orgánicos foto y/o electroactivos. El trabajo permitirá al estudiante adquirir experiencia multidisciplinar, incluyendo la síntesis orgánica y la utilización de técnicas de caracterización espectroscópicas y espectrométricas (RMN, FTIR, espectrometría de masas). Además, el estudiante se familiarizará con las técnicas de caracterización de materiales reticulares (DRX, adsorción de gases, microscopía SEM y TEM) y materiales foto/electroactivos (UV-vis, fluorescencia, voltamperometría cíclica).

Selección de publicaciones del grupo relacionadas con el proyecto:

- Nile Red-Based COF as a Photocatalyst for C–H Bond Functionalization; *ACS Catal.* **2025**, *15*, 10736
- Boosting Photoconductivity by Increasing the Structural Complexity of Multivariate COFs; *Small* **2025**, *21*, 2406211
- Scalable Synthesis and Electrocatalytic Performance of Highly Fluorinated COFs for Oxygen Reduction; *Angew. Chem. Int. Ed.* **2023**, *62*, e202313940
- Evaluation of the Oxygen Reduction Reaction Electrocatalytic Activity of Postsynthetically Modified COFs; *ACS Sustainable Chem. Eng.* **2023**, *11*, 1763

MASTERQO
MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGANICA
MENCIÓN DE MÁSTER EXCELENTE XUNTA DE GALICIA

UAM Universidad Autónoma de Madrid
UNIVERSIDAD COMPLUTENSE MADRID
USC UNIVERSIDADE DE SANTIAGO DE COMPOSTELA
XUNTA DE GALICIA

PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2025-2026

DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE

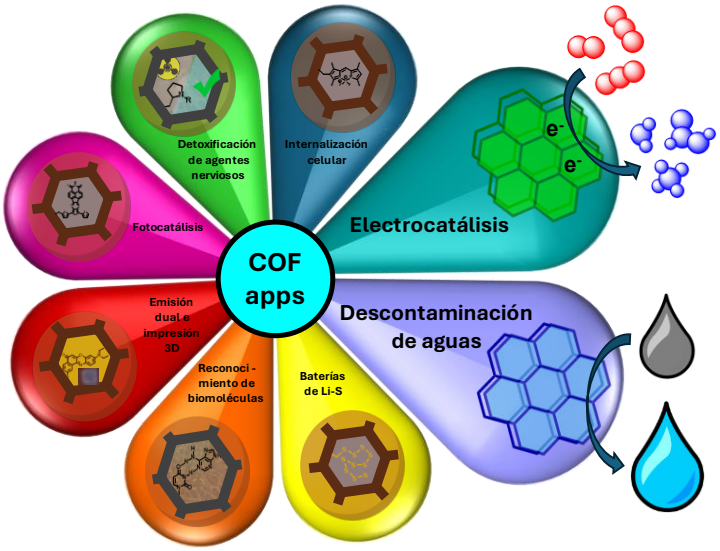
Apellidos y nombre del director(es) del proyecto: SERGIO ROYUELA COLLADO JOSÉ LUIS SEGURA CASTEDO	
Cargo: SRC: Profesor Ayudante Doctor JLSC: Catedrático de Universidad	
Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto: Departamento de Química Orgánica. Facultad de Química. Universidad Complutense de Madrid. 28040-Madrid	
Teléfono directo SRC: 913945143 JLSC: 913945142	**e-mail** SRC: s.royuela@ucm.es JLSC: segura@ucm.es

DATOS DEL PROYECTO

Título: Síntesis y Funcionalización de Redes Orgánicas Covalentes (COFs): Nuevos Materiales para Aplicaciones Sostenibles

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

Los Materiales Reticulares son una clase de materiales avanzados que se caracterizan por sus estructuras altamente ordenadas y porosas, obtenidos mediante la conexión controlada de unidades moleculares. Este proyecto se enfoca específicamente en las redes orgánicas covalentes (covalent organic frameworks, COFs), una familia de materiales puramente orgánicos y formados por enlaces covalentes. Su diseño permite controlar de manera precisa la composición, la topología y la porosidad de la red, generando estructuras con poros típicamente entre 1 y 5 nanómetros y orden a largo alcance. Estas características, junto con su alta estabilidad y su baja densidad, los hacen muy atractivos de cara a aplicaciones en diversos campos como la separación de gases, la catálisis, o la captura de contaminantes, entre otras.



El presente trabajo se enmarca en la línea de investigación del grupo centrada en modular las propiedades singulares de estos materiales para adecuarlos a aplicaciones determinadas. Como objetivo principal se plantea la síntesis de COFs con funcionalidades específicas que les confieran un mayor rendimiento en su campo de aplicación. Para ello se utilizarán tanto métodos de síntesis convencionales como no convencionales, tales como la síntesis solvotermal y la sonoquímica. Posteriormente se llevará a cabo una caracterización y estudio en profundidad de las propiedades de los materiales obtenidos y se explorará su aplicación en campos como la electrocatálisis, en concreto la reacción de reducción de oxígeno (ORR) o la reacción de reducción de CO_2 (CO_2RR); o la captura de contaminantes orgánicos emergentes para la descontaminación de aguas.

Los materiales se caracterizarán mediante técnicas de determinación estructural general (RMN, FTIR) así como técnicas de caracterización de materiales reticulares (DRX, BET, SEM, TEM). Adicionalmente, se emplearán las técnicas especializadas para la aplicación seleccionada, entre las se encuentran la

espectroscopía UV-vis, voltamperometrías (cíclica y de barrido lineal hidrodinámico) e isotermas y cinéticas de adsorción. Los resultados obtenidos se estudiarán en colaboración con grupos de investigación especialistas en el campo, contribuyendo así al desarrollo de nuevos materiales funcionales de interés tanto desde el punto de vista académico como de las aplicaciones prácticas.

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

Formación en síntesis orgánica y 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

El proyecto se desarrollará en el Grupo de materiales orgánicos macromoleculares y heterocíclicos (**www.ucm.es/macromater**) que desarrolla su investigación en la frontera entre la síntesis orgánica, la química reticular y el desarrollo de materiales orgánicos foto y/o electroactivos. El trabajo permitirá al estudiante adquirir experiencia multidisciplinar, incluyendo la síntesis orgánica y la utilización de técnicas de caracterización espectroscópicas y espectrométricas (RMN, FTIR, espectrometría de masas). Además, el estudiante se familiarizará con las técnicas de caracterización de materiales reticulares (DRX, adsorción de gases, microscopía SEM y TEM) y materiales foto/electroactivos (UV-vis, fluorescencia, voltamperometría cíclica).

Selección de publicaciones del grupo relacionadas con el proyecto:

- Post-synthetic modification of COFs with active manganese centers for electrocatalytic CO_2 reduction in water; *J. Mater. Chem. A*, **2025**,*13*, 1142
- Ionic COF as Antibacterial Additive for Biobased Polymers; *ACS Appl. Mater. Interfaces* **2024**, *16*, 70883
- BODIPY doping of COFs-based nanomaterials: A novel strategy towards biomedical applications; *Dyes Pigm.* **2023**, *219*, 111561
- COFs based on electroactive naphthalenediimide as active electrocatalysts toward oxygen reduction reaction; *Appl. Mater. Today* **2022**, *26*, 101384

MASTERQO
MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGANICA
MENCIÓN DE MÁSTER EXCELENTE XUNTA DE GALICIA

UAM Universidad Autónoma de Madrid
UNIVERSIDAD COMPLUTENSE MADRID
USC UNIVERSIDADE DE SANTIAGO DE COMPOSTELA
XUNTA DE GALICIA

PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2025-2026

DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE

Apellidos y nombre del director(es) del proyecto: Miguel A. Sierra Rodríguez-Mar Gómez Gallego	
Cargo: Catedráticos de Química Orgánica	
Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto: Departamento de Química Orgánica, Facultad de Ciencias Químicas, UCM. Avda. Complutense s/n. 28040 Madrid	
Teléfono directo 91-3944310/913944147	**e-mail** sierraor@ucm.es, margg@ucm.es

DATOS DEL PROYECTO

Título: SÍNTESIS DE SISTEMAS POLIMETÁLICOS MIMÉTICOS DE HIDROGENASA PARA LA BIO-PRODUCCIÓN DE HIDROGENO VERDE USANDO METALES DE TRANSICIÓN

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.

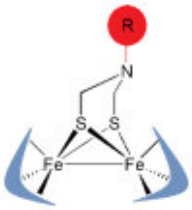


Figura 1. Estructura de un mimético de [FeFe]-hidrogenasa

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 UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGANICA
MENCIÓN DE MÁSTER EXCELENTE XUNTA DE GALICIA

RELACIÓN DE PROYECTOS DE TRABAJO FIN DE MÁSTER OFERTADOS POR LA USC. CURSO 2025-26

Grupo de Investigación				
Institución/Empresa	*Código*	*Título del proyecto*	*Directo(res) del proyecto*	*Lugar de realización*
USC	USC-QO-TFM-1	Polímeros moleculares anticontaminantes	Juan Carlos Estévez Cabanas Rafael Rodríguez Riego	CIQUS
USC	USC-QO-TFM-2	Coacervados Dendríticos como Plataforma para la Interacción entre Células Sintéticas y Naturales	Eduardo Fernández Megía	CIQUS

Grupo de Investigación				
Institución/Empresa	*Código*	*Título del proyecto*	*Directo(res) del proyecto*	*Lugar de realización*
USC	USC-QO-TFM-3	Photocatalytic Methane functionalization under blue light	Martín Fañanas Mastral Akshay Nair	CIQUS
USC	USC-QO-TFM-4	Síntesis de derivados de ácidos β-aminoalquilborónicos a través de química metalafotoredox	Martín Fañanas Mastral Eva Rivera Chao	CIQUS

Grupo de Investigación				
Institución/Empresa	*Código*	*Título del proyecto de TFM ofertado*	*Directo(res) del proyecto*	*Lugar de realización*
USC	USC-QO-TFM-5	Nuevos antibióticos de precisión basados en la inhibición del enzima siquimato quinasa	Concepción González Bello	CIQUS

Grupo de Investigación				
Institución/Empresa	*Código*	*Título del proyecto de TFM ofertado*	*Directo(res) del proyecto*	*Lugar de realización*
USC	USC-QO-TFM-6	Reacciones bioortogonales para el marcaje de especies supramoleculares mediante reacciones de cicloadición [2+2+2] catalizada por Rutenio	Juan R. Granja Guillán Carlos Saá Rodríguez	CIQUS
USC	USC-QO-TFM-7	Estudio del transporte transmembrana de péptidos modificados con clusters de boro supercaotrópicos	Javier Montenegro García José López Fernández	CIQUS

USC	USC-QO-TFM-8	Estudio Computacional de Péptidos Terapéuticos Dirigidos a Membranas Tumorales	Rebeca García Fandiño	CIQUS

Grupo de Investigación				
Institución/Empresa	*Código*	*Título del proyecto de TFM ofertado*	*Directo(res) del proyecto*	*Lugar de realización*
USC	USC-QO-TFM-9	Catálisis enantioselectiva con oro: nuevas estrategias y métodos sintéticos	José Luis Mascareñas Cid Fernando López García	CIQUS
USC	USC-QO-TFM-10	QUÍMICA SOSTENIBLE: REACCIONES CATALÍTICAS EFICIENTES USANDO PROCESOS DE ACTIVACIÓN DE ENLACES C-H	Fernando López García José Luis Mascareñas Cid	CIQUS
USC	USC-QO-TFM-11	Síntesis de azulenos mediante metodologías de activación C-H con complejos de Rh(III)	Moisés Gulías Costa	CIQUS

Grupo de Investigación				
Institución/Empresa	*Código*	*Título del proyecto de TFM ofertado*	*Directo(res) del proyecto*	*Lugar de realización*
USC	USC-QO-TFM-12	Funcionalización fotoquímica de azúcares desprotegidos	Manuel Nappi	CIQUS

Grupo de Investigación				
Institución/Empresa	*Código*	*Título del proyecto de TFM ofertado*	*Directo(res) del proyecto*	*Lugar de realización*
USC	USC-QO-TFM-13	Design and synthesis of vitamin D ligands of the vitamin D transport protein (DBP) for BNCT cancer therapy	Manuel Paz Castañal Antonio Mouriño Mosquera	Fac. Química

Grupo de Investigación				
Institución/Empresa	*Código*	*Título del proyecto de TFM ofertado*	*Directo(res) del proyecto*	*Lugar de realización*
USC	USC-QO-TFM-14	Síntesis de nanografenos nitrogenados mediante el uso de ciclopentadienonas	Dolores Pérez Meirás Iago Pozo Míguez	CIQUS
USC	USC-QO-TFM-15	Nuevos materiales moleculares π-extendidos: integración de porfirinas en arquitecturas nanográfénicas	Diego Peña Gil Ana Rita Monteiro	CIQUS

USC	USC-QO-TFM-16	Diseño y síntesis de moléculas para el estudio de reacciones electroquímicas selectivas a nivel unimolecular	Iago Pozo Míguez Diego Peña Gil	CIQUS

Grupo de Investigación	

Institución/Empresa	*Código*	*Título del proyecto de TFM ofertado*	*Directo(res) del proyecto*	*Lugar de realización*
USC	USC-QO-TFM-17	Caja de Grafito Cúbico $C_{60}H_{36}$: Estudios de Complejación y Propiedades Redox	Carlos Saá Rodríguez Jesús A. Varela Carrete	CIQUS
USC	USC-QO-TFM-18	Complejos de Tierras Raras (Y, Gd, Tb, Dy) con PAHs Tridimensionales	Jesús A. Varela Carrete Carlos Saá Rodríguez	CIQUS

Grupo de Investigación	

Institución/Empresa	*Código*	*Título del proyecto de TFM ofertado*	*Directo(res) del proyecto*	*Lugar de realización*
USC	USC-QO-TFM-19	Sensores de kinasas a través de Fluorescencia No Aromática (GlowSticks)	M. Eugenio Vázquez Sentís	CIQUS

MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGANICA
MENCIÓN DE MÁSTER EXCELENTE XUNTA DE GALICIA

PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2025-2026

DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE

Apellidos y nombre del director(es) del proyecto: Juan Carlos Estévez Cabanas / Rafael Rodríguez Riego	
Cargo: Catedrático de Química Orgánica/Investigador Ramón y Cajal	
Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto: Centro Singular de Investigación en Química Biolóxica e Materiáis Moleculares (CiQUS) e Departamento de Química Orgánica. USC. Rúa Jenaro de la Fuente S/N. Campus Vida.	
Teléfono directo 881815730	**e-mail** juancarlos.estevez@usc.es

DATOS DEL PROYECTO

Título: Polímeros moleculares anticontaminantes

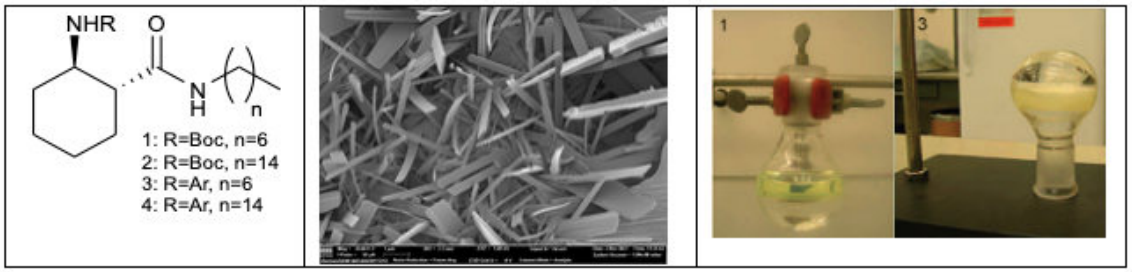
Breve descripción de los objetivos, contenido del proyecto y tareas a realizar

El descubrimiento de moléculas capaces de autoorganizarse en **polímeros moleculares**, formando geles con capacidad para absorber sustancias, representa un primer paso hacia el desarrollo de **materiales diseñados** para eliminar contaminantes en diversos entornos, como el agua, el aire o los suelos afectados por contaminantes como aceites, derivados del petróleo o tintes industriales, entre otros. Sin embargo, el uso práctico de estos materiales aún enfrenta varios desafíos que deben superarse para garantizar una implementación eficiente y sostenible. Entre los principales retos se encuentran su capacidad de absorción, selectividad, regeneración, biocompatibilidad y costo.

Para abordar estos retos, nuestro grupo de investigación ha diseñado una nueva familia de moléculas con estructura de alquilamidas derivadas de ácidos 2-aminociclohexanocarboxílicos (**1** y **2**). Estas moléculas han demostrado excelentes propiedades gelificantes en una amplia variedad de disolventes, y algunos de los hidrogeles formados han mostrado un gran potencial en la limpieza de aguas contaminadas con aceites y petróleo.

En este proyecto proponemos ampliar nuestra familia de moléculas con el objetivo de optimizar sus propiedades. Para ello, estudiaremos moléculas con la estructura de **3** y **4**, en las que, manteniendo las unidades estructurales de alquilamida y β-aminoácido ciclohexánico —elementos clave para favorecer su autoorganización—, sustituiremos el grupo funcional Boc por diferentes grupos aromáticos (benceno, bencilo, naftaleno, fenantreno, etc). Esta modificación permitirá incorporar un nuevo elemento de estructuración basado en interacciones π-π, lo que previsiblemente dará lugar a geles con propiedades reológicas mejoradas y una mayor capacidad de absorción.

Se trata de un trabajo multidisciplinar que abarca la síntesis de las moléculas diseñadas, el estudio de su estructuración en disolución, la caracterización de los geles formados y la evaluación de sus aplicaciones en la limpieza de aguas contaminadas con aceites, petróleo y tintes.



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

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

MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGANICA
MENCIÓN DE MÁSTER EXCELENTE XUNTA DE GALICIA

PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2025-2026

DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE

Apellidos y nombre del director del proyecto: Eduardo Fernández Megía	
Cargo: Catedrático de Química Orgánica e Investigador Principal del CiQUS	
Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto: Departamento de Química Orgánica, USC, CiQUS	
Teléfono directo 8818 15727	**e-mail** ef.megia@usc.es

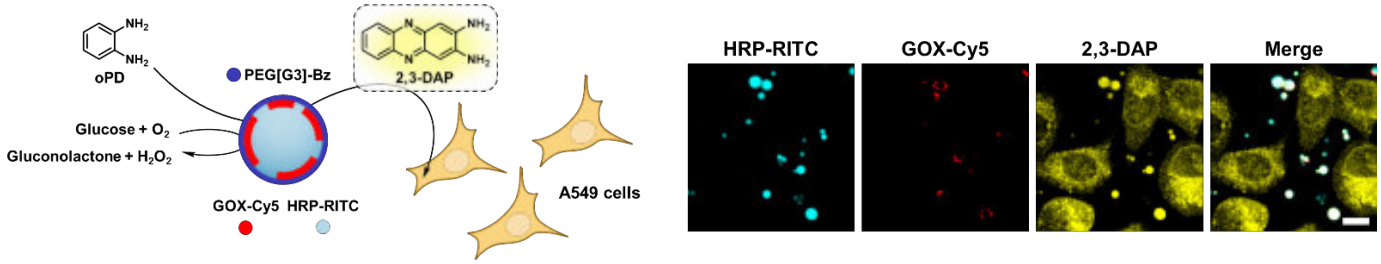
DATOS DEL PROYECTO

Título: Coacervados Dendríticos como Plataforma para la Interacción entre Células Sintéticas y Naturales

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

Aunque la preparación de células artificiales completamente funcionales está fuera del alcance de la tecnología actual, la construcción de modelos celulares sintéticos que desempeñan funciones naturales representa un primer paso hacia este objetivo. Además, a medida que las células sintéticas consigan imitar a las vivas, se desvelarán misterios de la biología que ayudarán a una comprensión más profunda de las formas prebióticas de vida, así como al desarrollo de nuevas aplicaciones terapéuticas.

El objetivo de este proyecto es el desarrollo de células sintéticas capaces de comunicarse con células y tejidos naturales. Para ello, utilizamos dendrímeros, polímeros monodispersos y arborescentes (frecuentemente denominados proteínas artificiales), que confieren a las células sintéticas una elevada estabilidad en condiciones fisiológicas. Se prepararán coacervados dendríticos, recientemente desarrollados por nuestro grupo (ver Figura), capaces de replicar funciones típicas de células naturales, tales como la encapsulación de enzimas y la rápida comunicación mediante cascadas enzimáticas. Posteriormente, se evaluará su capacidad de ensamblarse jerárquicamente formando tejidos artificiales y comunicarse con células naturales mediante señales químicas, provocando en éstas, respuestas indirectas a estímulos externos. Nuestro objetivo es desarrollar las capacidades de los coacervados dendríticos como una plataforma de células sintéticas para el transporte selectivo de enzimas terapéuticas, ingeniería de tejidos y medicina regenerativa.



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

Buscamos candidatos motivados con experiencia en síntesis orgánica y determinación estructural, abiertos a una investigación multidisciplinar. 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

MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGANICA
MENCIÓN DE MÁSTER EXCELENTE XUNTA DE GALICIA

PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2025-2026

DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE

Apellidos y nombre del director(es) del proyecto: Fañanás Mastral, Martín / Nair, Akshay M.	
Cargo: Oportunius Research Professor / Marie Curie postdoctoral fellow	
Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto: CiQUS, USC, Jenaro de la Fuente s/n, 15705 Santiago de Compostela	
Teléfono directo (+34) 881815787	**e-mail** martin.fananas@usc.es / akshaymurali.nair@usc.es

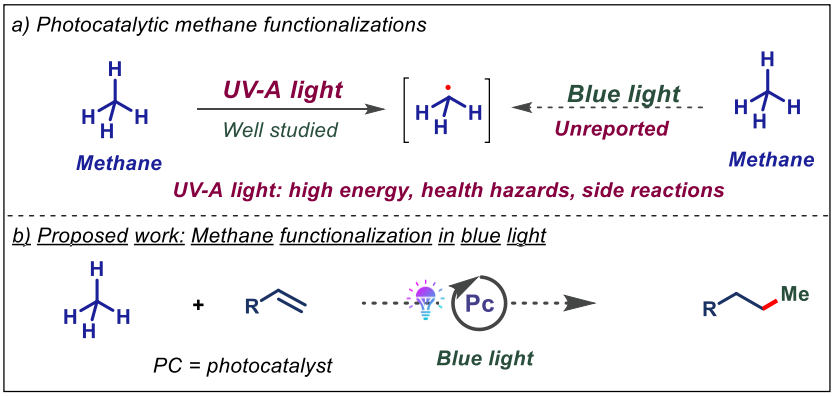
DATOS DEL PROYECTO

Título: Photocatalytic Methane functionalization under blue light

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

Methane is one of the most abundant, underutilized carbon-based chemical feedstocks on the planet. Moreover, this simplest alkane is one of the most potent greenhouse gases in the atmosphere due to which United Nations has launched the global methane initiative for achieving a 30% reduction in its emission by 2030. The current methodologies for the utilization and disposal of methane gas suffer due to being cost intensive and non-sustainable. As a result, there is an urgent need to develop protocols that allow the transformation of this greenhouse gas into valuable products in a profitable manner. In recent years, hydrogen atom transfer photocatalysis has emerged as a viable platform to generate methyl radicals from methane to facilitate value added transformations.[1] These transformations rely on the use of high energy UV-A irradiation (360-390 nm) which leads to off target side reactions and health hazards. As a result, it is important to develop photocatalytic methane functionalizations under mild visible-light irradiation.

Building on our expertise in the functionalization of methane and other gaseous alkanes,[2] in the current project we will develop a novel catalytic platform for carrying out methane functionalization under blue light irradiation (Scheme 1). In-situ methyl radicals, generated by hydrogen atom transfer from methane, would be utilised to carry out anti-Markovnikov hydromethylation of alkenes. The proposed protocol is highly facile, atom economic, energy efficient and sustainable.



Scheme 1

MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGANICA
MENCIÓN DE MÁSTER EXCELENTE XUNTA DE GALICIA

The student will screen different photocatalysts and light sources to find a system that allows the proposed transformation under blue-light irradiation. After identifying a suitable photocatalyst, different reaction conditions (solvent, LED light, additives, etc.) will also be screened order to improve the performance of the process. If time is available, the scope of the reaction will be studied.

The student will become familiar with how a research laboratory works and will learn state-of-the-art techniques on organic synthesis and photocatalysis such as Nuclear Magnetic Resonance, Gas/Mass Chromatography or High Pressure Liquid Chromatography. Due to the sustainable nature of the project the student will also be trained in the facets and principles of green chemistry.

References:

1) Velasco-Rubio, A.; Martínez-Balart, P.; Álvarez-Constantino, A. M.; Fañanás-Mastral, M. *Chem. Commun*. **2023,** *59*, 9424.
2) a) Nair, A. M., Martínez-Balart, P., Barbeira-Arán, S. Fañanás-Mastral, M. *Angew. Chem. Int. Ed*. **2025**, *64*, e202416957; b) Martínez-Balart, P.; Velasco-Rubio, A.; Barbeira-Aran, S.; Jiménez-Cristóbal, H.; Fañanás-Mastral, M. *Green Chem.* **2024**, *26*, 11196.

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

BSc in Chemistry (Grado en Química)

Basic knowledge of organic synthesis

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

For more information about the research group, see:

https://www.usc.es/ciqus/es/grupos/fm-lab

https://fananasmastralgroup.com/

MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGANICA
MENCIÓN DE MÁSTER EXCELENTE XUNTA DE GALICIA

PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2025-2026

DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE

Apellidos y nombre del director(es) del proyecto: Fañanás Mastral, Martín / Rivera Chao, Eva	
Cargo: Oportunius Research Professor / Investigadora Postdoctoral Xunta de Galicia	
Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto: CiQUS, USC, Jenaro de la Fuente s/n, 15705 Santiago de Compostela	
Teléfono directo (+34) 881815787	**e-mail** martin.fananas@usc.es / eva.rivera@usc.es

DATOS DEL PROYECTO

Título: Síntesis de derivados de ácidos β-aminoalquilborónicos a través de química metalafotoredox

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

Los derivados de ácidos β-aminoalquilborónicos son estructuras de especial relevancia en química orgánica sintética y química médica. Esto se debe a la versatilidad química que le confiere el boro debido a la presencia de un orbital p vacío. Este orbital p vacío en conjunto con su geometría trigonal plana hace que el átomo de boro sea un bioisóstero ideal de los grupos carbonilo presentes en los aminoácidos. Por tanto, los derivados de ácidos β-aminoalquilborónicos se están estudiando como bioisóstero de β-aminoácidos con resultados muy prometedores.[1] Estos compuestos borilados tienen un gran potencial para el descubrimiento de nuevos fármacos; sin embargo, su uso y estudio está, hoy en día, limitado por la escasez o deficiencia de métodos sintéticos.

Una buena aproximación para su síntesis es la 1,2-aminoboración de alquenos en la que se introduce simultáneamente un grupo amina y un átomo de boro a un doble enlace. Estas metodologías son especialmente atractivas por la simpleza y abundancia de los alquenos, así como por la creación de moléculas de alta complejidad en un solo paso, haciéndolas más eficientes en comparación con otros métodos.

Los métodos descritos actualmente para la 1,2-aminoboración de alquenos utilizan metales de transición de manera catalítica (Cu o Pd) para acoplar una amina, un alqueno y bis(pinacolato)diboro (B_2pin_2).[2-5] A pesar de su eficiencia, el alcance de estas metodologías está limitado a dialquilaminas y alquenos con grupos donadores de electrones, impidiendo la síntesis de una gran librería de compuestos o la incorporación de otras estructuras relevantes, por ejemplo, *N*-heteroarenos. En este sentido, es necesario destacar la importancia de los compuestos aromáticos nitrogenados en química médica. Entre los 100 anillos más comunes en fármacos, 61 de ellos contienen nitrógeno y, dentro de éstos, 26 son arómaticos.[6]

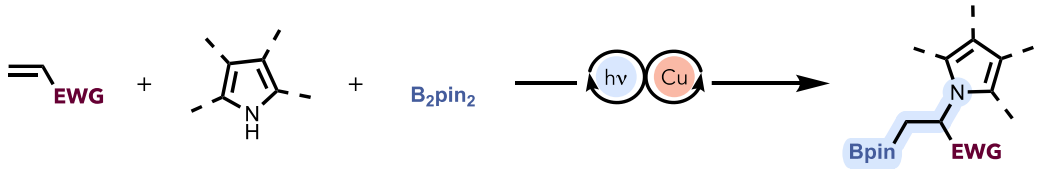


Figura 1.

En este contexto, este proyecto pretende sobrepasar las limitaciones de la química organometálica clásica para obtener una aproximación que pueda complementar los métodos existentes. El uso de la fotoquímica para desarrollar nuevas reacciones orgánicas está en auge actualmente. Esto es debido a las posibilidades que esta ofrece, pues permite desbloquear nuevos modos

de reactividad o selectividad en comparación con la química organometálica clásica. Este proyecto combina fotocatálisis y catálisis organometálica (metalafotoredox) para crear una nueva metodología para la síntesis de derivados de ácidos β-aminoalquilborónicos, permitiendo acoplar alquenos con grupos atractores de electrones, *N*-heteroarenos y bis(pinacolato)diboro (Figura 1).

El/La alumno/a ensayará distintos fotocatalizadores y complejos de cobre hasta encontrar un catalizador que permita llevar a cabo la reacción con alta eficiencia. 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.

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 (RMN), Cromatografía de Gases/Masas (CG-MS) y Cromatografía Quiral HPLC y SFC.

[1] X. Li, D. Hall *Adv. Synth. Catal.* **2021**, *363*, 2209−2223.
[2] N. Matsuda, K. Hirano, T. Satoh, M. Miura *J. Am. Chem. Soc.* **2013**, *135*, 4934−4937.
[3] R. Sakae, K. Hirano, M. Miura *J. Am. Chem. Soc.* **2015**, *137*, 6460−6463.
[4] Z. Liu, H.-Q. Ni, T. Zeng, K. M. Engle *J. Am. Chem. Soc.* **2018**, *140*, 3223−3227.
[5] B. L. Gay, Y.-N. Wang, S. Bhatt, A. Tarasewicz, D. J. Cooke, E. G. Milem, B. Zhang, J. B. Gary, M. L. Neidig, K. L. Hull *J. Am. Chem. Soc.* **2023**, *145*, 18939−18947.
[6] M. M. Heravi, V. Zadsirjan, *RSC Adv.* **2020**, *10*, 44247−44311.

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

https://fananasmastralgroup.com/

MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGÁNICA

PROPUESTA DE PROYECTO DE TRABAJO FIN DE MÁSTER (Curso académico 2025/26)

DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE

Apellidos y nombre del director del proyecto: GONZÁLEZ BELLO, CONCEPCIÓN	
Cargo: CATEDRÁTICA DE UNIVERSIDAD e INVESTIGADORA PRINCIPAL EN EL CIQUS	
Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto: QUÍMICA ORGÁNICA, USC; CIQUS, calle Jenaro de la Fuente s/n, 15782 Santiago de Compostela	
Teléfono directo **881 815726**	**e-mail** concepcion.gonzalez.bello@usc.es

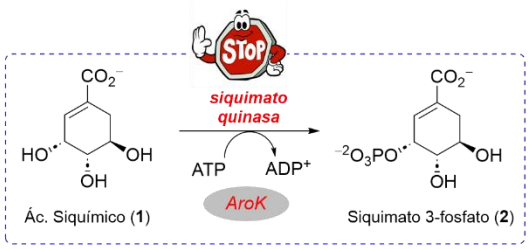
DATOS DEL PROYECTO

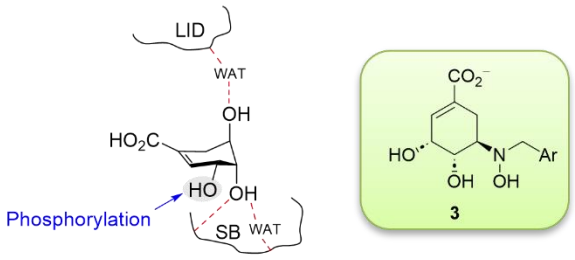
Título: *Nuevos antibióticos de precisión basados en la inhibición del enzima siquimato quinasa*

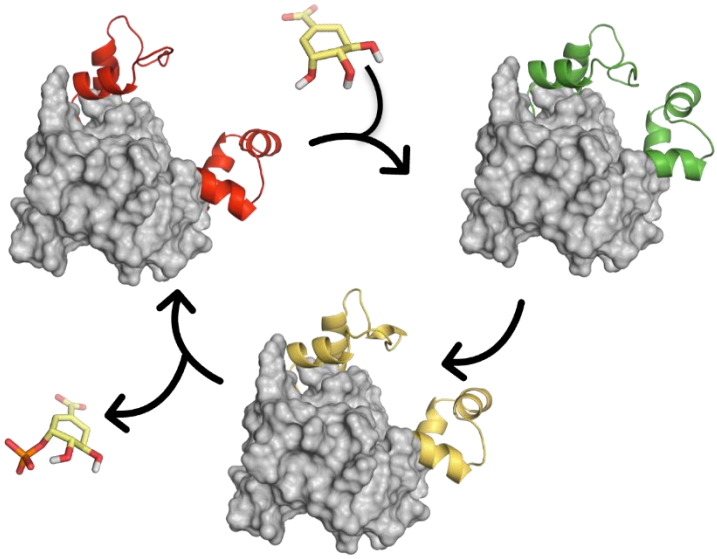
Breve descripción de los objetivos, contenido del proyecto y tareas a realizar

Actualmente, la capacidad de los antibióticos para curar las enfermedades infecciosas causadas por bacterias patógenas está en grave riesgo debido a las consecuencias del uso de antibióticos de amplio espectro en la estabilidad del microbioma y la resistencia creciente de los patógenos a estos fármacos. Los resultados decepcionantes de este enfoque, así como el gran éxito de la medicina de precisión en oncología, han desencadenado un gran cambio en la perspectiva del descubrimiento de antibióticos para centrar la atención en los antibióticos de espectro más reducido. Los antibióticos de precisión con funciones bien definidas y que inciden sobre dianas terapéuticas novedosas están surgiendo como un medio, para abordar las infecciones sin dañar el microbioma ni incentivar la resistencia. La fusión de nuevas clases de antibióticos, objetivos clínicamente no explotados y un nuevo mecanismo de acción parece una excelente combinación para mitigar el riesgo de resistencia preexistente. Los agentes antimicrobianos selectivos minimizarán los efectos adversos sobre el microbioma y las comorbilidades inducidas por los tratamientos actuales, así como también reducirán la selección y el impacto de las cepas resistentes en humanos, animales y ecosistemas.

En nuestro grupo de investigación estamos estudiando esta posibilidad mediante el desarrollo de inhibidores del enzima siquimato quinasa (SQ), un enzima esencial en la bacteria gram-negativa *Pseudomonas aeruginosa*, una de las principales causas de infecciones nosocomiales y considerada un paradigma de resistencia a los antibióticos. Este enzima cataliza la fosforilación selectiva del ácido siquímico (**1**) a siquimato 3-fosfato (**2**) utilizando ATP como cofactor.[1]







La mayoría de las aproximaciones utilizadas en el diseño racional de inhibidores de este enzima (y otras dianas), se basan en estudios de modelado molecular (docking) o cribados virtuales utilizando las estructuras cristalinas disponibles, que son complejos binarios del enzima con uno de los sustratos (ATP o **1**) o complejos ternarios con **1** y ADP, en las que se observa una conformación cerrada del centro activo. En consecuencia, los posibles resultados de estos estudios vendrán definidas por el hueco disponible, es decir, por la conformación utilizada del enzima. Sin embargo, los enzimas son sistemas dinámicos que pueden

adoptar diversas conformaciones durante la catálisis, y esto también podría explotarse en el diseño de inhibidores, ya que la flexibilidad es esencial para la catálisis. Para el diseño de inhibidores enzimáticos, además de estabilizar una disposición cerrada del centro activo que previene la entrada del sustrato(s), parece razonable que el evitar el cierre del centro activo para la catálisis también podría ser una estrategia alternativa interesante. Este enfoque basado en el movimiento permite el diseño de ligandos que se dirigen a cavidades adicionales generadas durante este movimiento pero que tienen acceso limitado (o nulo) en la conformación cerrada.[2-6]

En este proyecto fin de máster se estudiará la posibilidad de lograr este objetivo mediante las hidroxilaminas **3**. Para ello, se abordará la introducción de diversos sustituyentes en la posición C5 del sustrato natural **1**. El alumno deberá identificar los compuestos objetivo mediante las técnicas espectroscópicas convencionales, RMN, IR, etc., que deberá aprender a manejar, así como a interpretar los espectros obtenidos. Se estudiará la actividad in vitro de los compuestos obtenidos frente a cepas cepas resistentes de *P. aeruginosa*. Estas investigaciones forman parte de uno de los objetivos del proyecto recientemente concedido por la Agencia Estatal de Investigación "NUEVOS AGENTES ANTIBACTERIANOS DE PRECISION Y TERAPIAS COMBINADAS PARA COMBATIR INFECCIONES MULTIRRESISTENTES (PID2022-136963OB-I00)".

(1) C. González-Bello, *Curr. Top. Med. Chem.* **2016**, *16*, 960-977.

(2) B. Blanco, V. Prado, E. Lence, J. M. Otero, C. Garcia-Doval, M. J. van Raaij, A. L. Llamas-Saiz, H. Lamb, A. R. Hawkins and C. González-Bello, *J. Am. Chem. Soc.* **2013**, *135*, 12366.

(3) V. Prado, E. Lence, M. Maneiro, J. C. Vázquez-Ucha, A. Beceiro, P. Thompson, A. R. Hawkins and C. González-Bello. *J. Med. Chem.* **2016**, *59*, 5471.

(4) V. Prado, E. Lence, P. Thompson, A. R. Hawkins and C. González-Bello. *Chem., Eur. J.* **2016**, 22, 17988.

(5) M. Pernas, B. Blanco, E. Lence, P. Thompson, A. R. Hawkins and C. González-Bello. *Org. Chem. Front.* **2019**, *6*, 2514.

(6) más información en la página web del grupo www.gonzalezbello.com

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 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. Así mismo, el proyecto será de interés para aquellos alumnos que pretendan expandir y mejorar sus competencias en síntesis orgánica, ya que la preparación de estos compuestos implica la utilización de diferentes tipos de reacciones de síntesis orgánica.

MASTERQO
MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGANICA
MENCIÓN DE MÁSTER EXCELENTE XUNTA DE GALICIA

UAM Universidad Autónoma de Madrid
UNIVERSIDAD COMPLUTENSE MADRID
USC UNIVERSIDADE DE SANTIAGO DE COMPOSTELA
XUNTA DE GALICIA

PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2025-2026

DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE

Apellidos y nombre del director(es) del proyecto: Granja Guillán, Juan R. y Saa Rodríguez, Carlos	
Cargo: Catedráticos de química Orgánica	
Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto: Química Orgánica (USC), en los laboratorios de Juan Granja en el CiQUS	
Teléfono directo 881815746	**e-mail** juanr.granja@usc.es

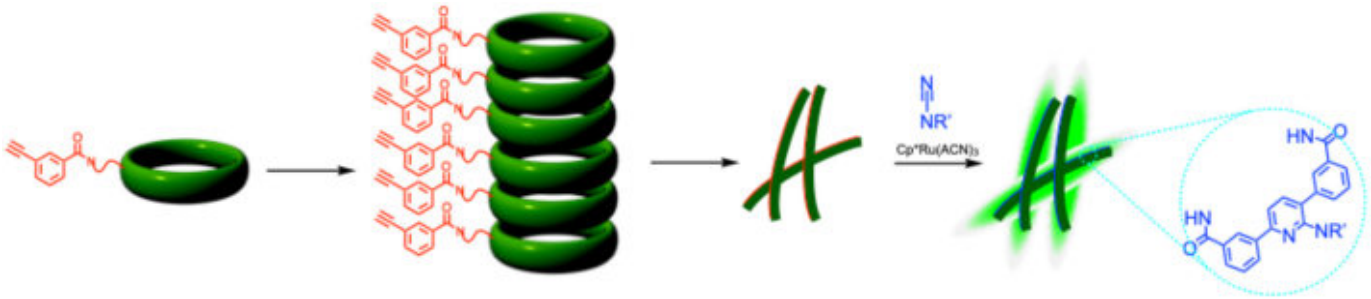
DATOS DEL PROYECTO

Título: Reacciones bioortogonales para el marcaje de especies supramoleculares mediante reacciones de cicloadición [2+2+2] catalizada por Rutenio

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

Las reacciones que tiene lugar en medios biológicos de forma selectiva y eficiente sin alterar los procesos naturales se conocen como reacciones bioortogonales.[1] Con este fin se deben desarrollar nuevos procesos, que transcurran de forma eficiente en medios acuosos o biológicos y den lugar a productos con propiedades únicas por su modo de acción o que tengan propiedades ópticas o electrónicas que faciliten su detección. Los procesos supramoleculares, aquellos que tiene lugar por asociación entre moléculas gobernada por las interacciones no covalentes, son uno de los pilares fundamentales de la vida, ya que es mas eficiente, su utilizan componentes mas pequeños que son más fáciles de sintetizar, y su reversibilidad, lo que permite su regulación agregándose o disociándose por un cambio en la forma o propiedades de sus componentes básicos, o simplemente cambiando las condiciones locales.[2] Por tanto el atrapado de estas especies supramoleculares y su marcaje con especies luminiscente representa una atractiva herramienta que aún no esta suficientemente desarrollado.

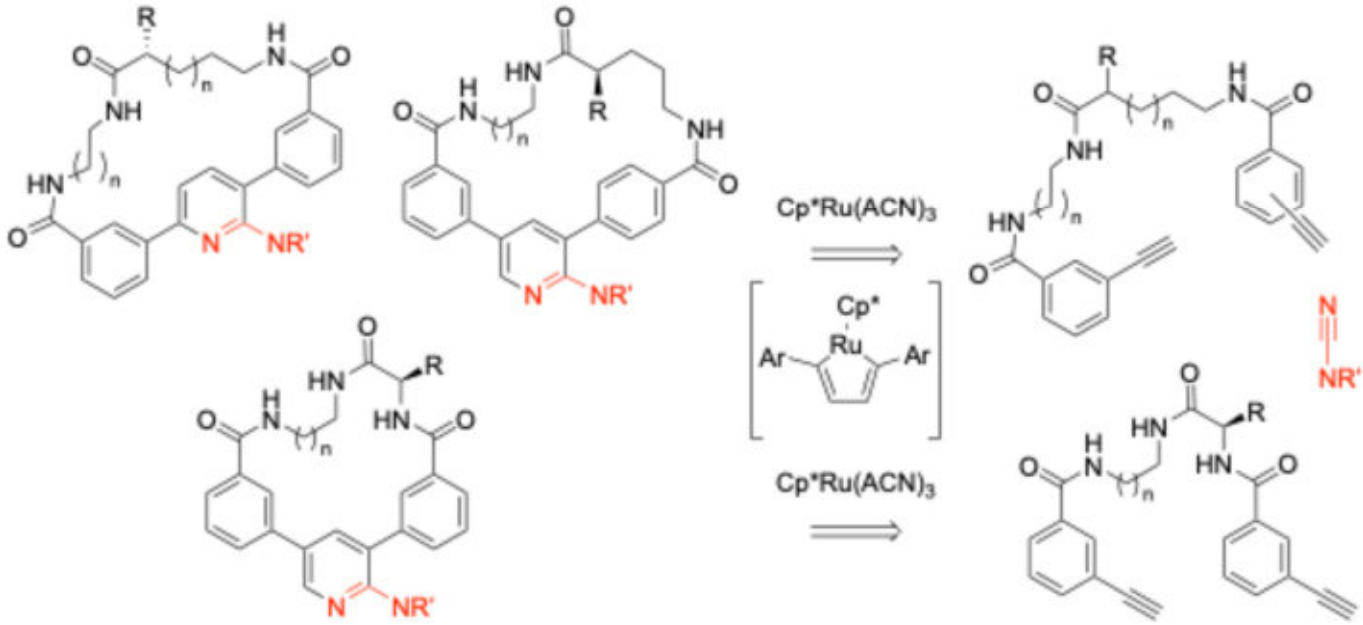
Los nanotubos formados por al autoensamblaje molecular son derivados cilíndricos huecos con una superficie peptídica externa. Se tratan, por tanto, de especies supramoleculares cuya formación (o disociación) se puede regular mediante diversos estímulos como el cambio de pH, el uso de la luz o condiciones red-ox.[3] Sus propiedades externas y forma, los hace especialmente útiles como posibles herramientas que modifiquen el citoesqueleto celular.



En el presente proyecto se pretende seguir estudiando una reacción de trimerización de alquinos y nitrilos catalizada por complejos de rutenio desarrollada en el grupo del Prof. Carlos Saá y que últimamente ha optimizado para su realización en medios acuosos. Esta reacción, consiste en una dimerización de fenilacetilenos para formar un metalaciclo que posteriormente reacciona con cianamidas para formar las correspondientes piridinas, cuyas propiedades espectroscópicas las hace especialmente interesantes. Esta reacción se pretende estudiar con ciclopéptidos que porten un fenilacetileno y utilizar la “alta concentración efectiva” gracias a su ensamblaje para que la reacción tenga lugar de forma eficiente. La formación de este

cicloaducto debe dar lugar a especies supramoleculares fluorescente que debe permitir su localización con el microscopio confocal.

Durante este trabajo de tesis de máster se propone empezar estudiando el proceso de ciclación con modelo de difenilacetilenos como se ilustra en la figura para optimizar las condiciones de reacción, evaluar la regioselectividad para este tipo de procesos y abordar la quimioselectividad frente a otros grupos funcionales, que se puede llevar a cabo en este caso empleando como molécula conectora de ambos acetilenos diferentes aminoácidos. Una vez estudiado este proceso bimolecular de formación de una nueva clase de macrociclos fluorescentes, abordaremos el procesos supramolecular preparando un péptido cíclico que incorpore un fenilacetileno y estudiaremos su propiedad para autoensamblarse y formar nanotubos y posteriormente abordaremos la optimización de proceso de cicloadición [2+2+2] que permita visualizar los nanotubos resultantes.



Referencias

1 N. K. Devaraj *ACS Cent. Sci.* **2018**, *4*, 952−959

2 A. J. Savyasachi et al. *Chem* **2017**, *3*,764–811

3 J. R. Granja,et al. *Org. Biomol. Chem.* 2017**,** *15*, 4490–4505; J. R. Granja, et al. *Chem* **2023**, *9*, 3365–3378; J. R. Granja, et al. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2021**, *60*, 18838–18844; J. R. Granja *et al. Angew. Chem. Int. Ed.* **2020**, *59*, 6902–6908.

4 C. Saá, et al. *J. Org. Chem.* **2003**, *68*, 8595–8598

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

Conocimiento de química de péptidos y de síntesis. Química supramolecular y reactividad con derivados organometálicos

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

MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGANICA
MENCIÓN DE MÁSTER EXCELENTE XUNTA DE GALICIA

PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2025-2026

DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE

Apellidos y nombre del director(es) del proyecto: Javier Montenegro, José López Fernández	
Cargo: Profesor Titular, Investigador postdoctoral	
Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto: Departamento de Química Orgánica, CiQUS Calle Jenaro de la Fuente s/n, 15705, Santiago de Compostela	
Teléfono directo 0034-881-815791	**e-mail** javier.montenegro@usc.es ; jose.lopez@usc.es

DATOS DEL PROYECTO

Título: Estudio del transporte transmembrana de péptidos modificados con clusters de boro supercaotrópicos

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

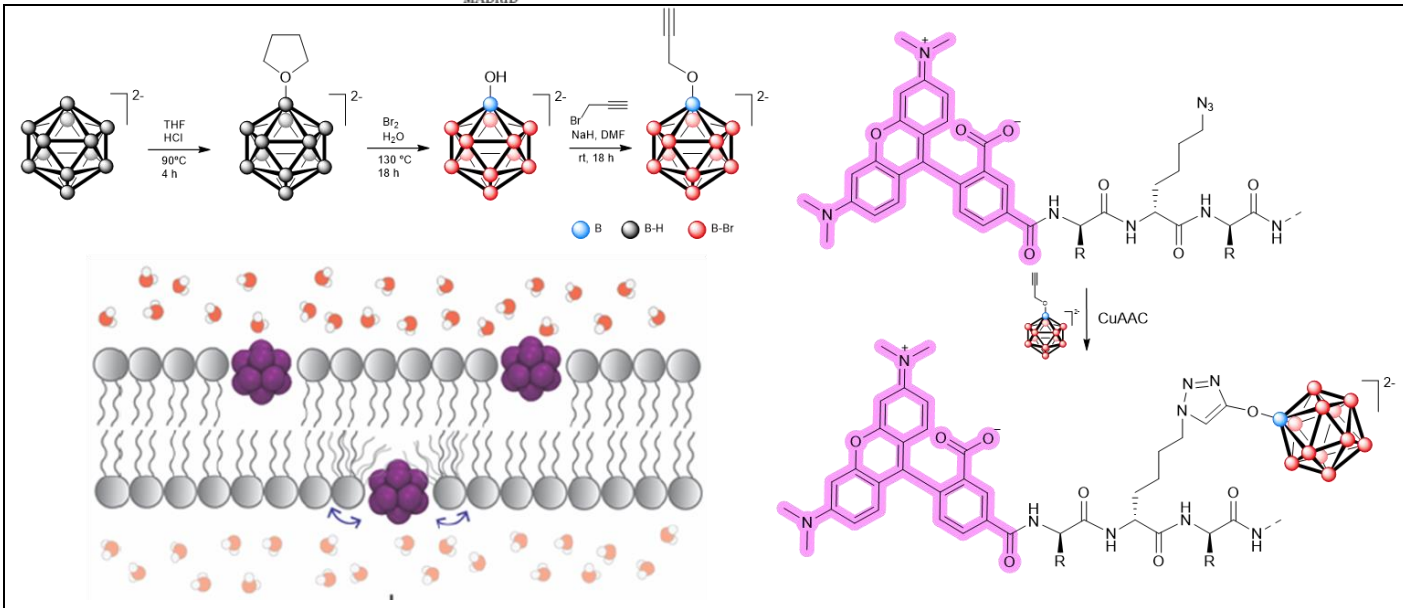
El transporte de moléculas hidrofílicas con potencial terapéutico a través de membranas lipídicas suele requerir el uso de vectores sintéticos. Hasta ahora, estos vectores se han basado principalmente en diseños anfifílicos integrados en sistemas multicomponente, polidispersos y de origen comercial, que presentan una capacidad limitada de ajuste estructural y definición molecular.[1]

En nuestro grupo de investigación, hemos identificado recientemente que los clústeres halogenados de boro, con estructura icosaédrica, alta solubilidad en medios acuosos y carga neta -2, presentan propiedades supercaotrópicas que los convierten en candidatos excepcionales para el transporte transmembrana de especies hidrofílicas. Estas unidades aniónicas son capaces de formar ensamblajes supramoleculares con una amplia variedad de huéspedes polares mediante interacciones no covalentes, lo que permite su vehiculización eficiente al interior celular.[2]

Sin embargo, este novedoso método de transporte supramolecular presenta todavía ciertas limitaciones como por ejemplo el transporte de moléculas de carga negativa (por ejemplo, ácidos nucleicos) debido a la repulsión de cargas o referente a la selectividad del transporte.

Con el objetivo de explorar su potencial como vectores de transporte intracelular, en este proyecto se diseñarán y sintetizarán conjugados covalentes clúster-péptido funcionalizados con sondas fluorescentes, que permitirán monitorizar su comportamiento en medios biológicos. Para ello, se prepararán derivados de clúster de boro portadores de grupos funcionales orgánicos adecuados para su acoplamiento selectivo a péptidos sintéticos marcados con fluoróforos.

La colección resultante de conjugados será evaluada biológicamente mediante ensayos que incluirán el análisis de eficiencia de internalización y citotoxicidad tanto in vitro como in vivo.



Referencias

[1] I. Lostalé-Seijo & J. Montenegro Nat. Rev. Chem 2018, 2, 258–77

[2] W. M. Nau, J. Montenegro et al. Nature 2022, 603, 637–42; W. M. Nau, J. Montenegro et al., JACS 2023, 145, 24, 13089–98.

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

Se recomienda que el/la estudiante cuente con conocimientos previos en:

- Química orgánica e inorgánica: fundamentos de síntesis, purificación y caracterización de compuestos.
- Técnicas básicas de laboratorio: manejo de atmósfera inerte, cromatografía, espectroscopía (RMN, UV-Vis), etc.
- Interés por la química supramolecular y/o la química biológica.
- Capacidad para trabajar en un entorno interdisciplinar y colaborativo.
- Iniciativa, curiosidad científica y disposición para aprender técnicas nuevas, tanto experimentales como teóricas.

No se exige experiencia previa en todos los aspectos del proyecto, pero sí una actitud proactiva, motivación por la investigación y disposición para formarse en un entorno altamente especializado y multidisciplinar.

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

Este proyecto representa un avance disruptivo en el estudio del transporte transmembrana, explorando el uso pionero de clústeres de boro como transportadores supercaotrópicos de baja toxicidad. Se trata de un enfoque completamente innovador con un enorme potencial tanto en investigación fundamental como en aplicaciones biomédicas.

El/la estudiante se incorporará a un proyecto pluridisciplinar, donde combinará síntesis orgánica e inorgánica, incluyendo la síntesis de péptidos y la funcionalización de clústeres de boro, que serán evaluados posteriormente en ensayos biológicos in vitro e in vivo.

La investigación se desarrollará en un grupo altamente interdisciplinar, que integra conocimientos y técnicas de química orgánica, inorgánica, supramolecular y biología, brindando al estudiante una formación completa y transversal. Además, el proyecto se llevará a cabo en el CiQUS, un centro de investigación de excelencia con el equipamiento más avanzado y un entorno altamente colaborativo. Para más información sobre nuestro grupo de investigación visitar www.javiermontenegrochemistry.com

MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGANICA
MENCIÓN DE MÁSTER EXCELENTE XUNTA DE GALICIA

PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2025-2026

DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE

Apellidos y nombre del director(es) del proyecto: **Rebeca García Fandiño**	
Cargo: Profesora titular	
Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto: Departamento de Química Orgánica, CiQUS	
Teléfono directo **881815735**	**e-mail** **rebeca.garcia.fandino@usc.es**

DATOS DEL PROYECTO

Título: Estudio Computacional de Péptidos Terapéuticos Dirigidos a Membranas Tumorales

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

El desarrollo de nuevos enfoques terapéuticos contra el cáncer es una prioridad en investigación biomédica, especialmente ante las limitaciones que presentan los tratamientos actuales: baja especificidad, toxicidad sistémica y aparición de resistencias. En este contexto, los péptidos terapéuticos que actúan sobre la membrana celular se han propuesto como alternativas prometedoras, debido a su capacidad para reconocer y desestabilizar selectivamente las membranas de células tumorales.

Las membranas de las células cancerosas presentan alteraciones en su composición lipídica y propiedades físico-químicas respecto a las membranas de células sanas, lo que puede ser explotado como diana terapéutica. Comprender los mecanismos moleculares mediante los cuales ciertos péptidos interactúan con estas membranas alteradas es esencial para avanzar en el desarrollo de tratamientos más eficaces y selectivos.

Este Trabajo de Fin de Máster se centra en el análisis, mediante simulaciones de Dinámica Molecular (MD), del comportamiento de un péptido con actividad anticancerígena frente a modelos de membrana representativos de células tumorales. A través de este enfoque computacional, se estudiarán los procesos de reconocimiento, inserción y posible desestabilización de la bicapa lipídica, con el objetivo de caracterizar las bases biofísicas de su actividad citotóxica selectiva.

Tareas a realizar:

Revisión bibliográfica sobre péptidos antitumorales y diferencias en la composición de membranas celulares en cáncer.

Preparación de modelos de membrana representativos de células cancerosas.

Configuración y ejecución de simulaciones de Dinámica Molecular utilizando software especializado (GROMACS).

Análisis estructural y dinámico de las trayectorias simuladas: interacción del péptido con la membrana, formación de defectos lipídicos, perturbaciones locales, etc.

Discusión de los mecanismos moleculares de acción observados y su relevancia terapéutica.

El proyecto se llevará a cabo en un entorno de computación científica de alto rendimiento, incluyendo el uso del superordenador Finisterrae III. Esta experiencia proporcionará al estudiante una sólida introducción a la biofísica molecular computacional, con aplicaciones directas en oncología, farmacología y diseño racional de terapias basadas en péptidos.

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

No se requieren conocimientos previos específicos para abordar este proyecto. Sin embargo, es deseable que el estudiante tenga familiaridad básica con herramientas de programación o entornos de trabajo en computación científica, especialmente en Bash

(terminal de Linux), Python o software relacionado con simulación molecular. Estos conocimientos no son imprescindibles y pueden adquirirse durante el desarrollo del trabajo,
Indíquese cualquier otra aclaración que se considere que pueda ayudar a los estudiantes en la elección del TFM Aunque no se exige experiencia previa en programación ni en simulación computacional, sí es importante que el estudiante tenga afinidad por el trabajo con ordenadores y una actitud proactiva para aprender herramientas digitales. El proyecto implica un enfoque computacional intensivo, por lo que se recomienda a quienes se sientan cómodos en entornos digitales.

MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGANICA
MENCIÓN DE MÁSTER EXCELENTE XUNTA DE GALICIA

PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2025-2026

DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE

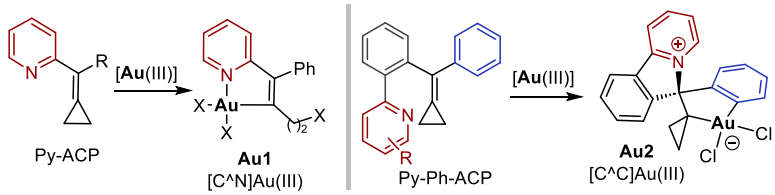
Apellidos y nombre del director(es) del proyecto: Jose L Mascareñas, Fernando López	
Cargo: CATEDRÁTICO DPTO QUÍMICA ORGÁNICA USC / IP del CIQUS INVESITAGOR CIENTIFICO CSIC, IP DEL CiQUS	
Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto: CiQUS	
Teléfono directo 881815781	**e-mail:** josel.mascarenas@usc.es / fernando.lopez@csic.es

DATOS DEL PROYECTO

Título: Catálisis enantioselectiva con oro: nuevas estrategias y métodos sintéticos

Durante las últimas décadas, la catálisis con oro(I) ha transformado la síntesis orgánica al introducir numerosos métodos sintéticos que permiten obtener esqueletos moleculares de gran valor. El desarrollo de variantes enantioselectivas ha progresado a un ritmo más lento, principalmente debido a las dificultades asociadas a la coordinación lineal de los iones Au(I), que sitúa el ligando quiral demasiado lejos del centro reactivo.

Los complejos de oro en estado de oxidación +3 [Au(III)], aunque son menos carbofílicos que sus homólogos de bajo estado de oxidación [Au(I)], presentan una geometría cuadrado-planar que favorece la inducción de asimetría. Sin embargo, la catálisis asimétrica utilizando Au(III) está claramente poco explorada.



En los últimos años, en colaboración con la Prof. C. Nevado, hemos descrito nuevos tipos de complejos [C^N]-Au(III) y otros de tipo [C^C]-Au(III), que son catalizadores eficientes para la funcionalización de alquenos.[1] El desarrollo de variantes quirales de estos complejos debería ofrecer grandes oportunidades en el campo de la catálisis asimétrica con Au(III).

Por otra parte, la catálisis Au(I)/Au(III) promovida por ligandos bidentados [P^N], también podría ser una buena alternativa para desarrollar nuevas estrategias enantioselectivas basadas en este metal.[2]

En este proyecto fin de master, continuaremos con nuestros esfuerzos en este ámbito,[3] desarrollando nuevos complejos quirales de oro (III) que permitan catalizar reacciones asimétricas sintéticamente relevantes. También ensayaremos nuevas metodologías asimétricas basadas en complejos que experimentan procesos redox entre sus estados de oxidación +1 y +3.

1. a) González, J.; Verdugo, F.; Mascareñas, J.; López, F.; Nevado, C. ***Angew. Chem. Int. Ed*** **2020**, *59*, 20049. b) González, J.; Tiang, P.; Arribas, A.; Díaz, S.; Mascareñas, J.; López, F.; Nevado, C. ***Angew. Chem Int Ed*** **2024**, *63, e202402798.*

2) Zeineddine, A.; Estevez, L.; Mallet-Ladeira, S.; Miqueu, K.; Bourissou, D. ***Nat. Commun.*** **2017,** *8*, 1.

3) Sergio Díaz Alonso, Tesis doctoral en curso.

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

MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGANICA
MENCIÓN DE MÁSTER EXCELENTE XUNTA DE GALICIA

PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2025-2026

DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE

Apellidos y nombre del director(es) del proyecto: **FERNANDO LOPEZ GARCIA / JOSÉ L. MASCAREÑAS**	
Cargo: INVESITAGOR CIENTIFICO CSIC, IP DEL CiQUS / CATEDRÁTICO DPTO QUÍMICA ORGÁNICA USCe IP del CIQUS	
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	**e-mail: fernando.lopez@csic.es**

DATOS DEL PROYECTO

Título: QUÍMICA SOSTENIBLE: REACCIONES CATALÍTICAS EFICIENTES USANDO PROCESOS DE ACTIVACIÓN DE ENLACES C-H

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

La formación de enlaces C–C requiere normalmente de grupos funcionales activantes en los sustratos. Esto no es deseable desde el punto de vista de la sostenibilidad, ya que estos grupos se suelen perder en el proceso, generando residuos. Por eso, uno de los grandes retos en síntesis consiste en la formación de este tipo de enlaces a partir de sustratos no funcionalizados, y usando reacciones catalíticas.[1] Un reto nada sencillo, pues requiere la activación de enlaces C–H, que son esencialmente inertes.

Nuestro grupo de investigación ha desarrollado procesos de formación de enlaces C-C mediante la activación de enlaces C-H basado en el uso de catalizadores de iridio.[2] Estos métodos permiten acceder, por ejemplo, a sistemas cíclicos con centros carbonados cuaternarios,[2a] muy atractivos ya que forman parte de muchos productos naturales bioactivos.[3]

En base a estos y otros precedentes del grupo,[4] en este proyecto de TFM estudiaremos el potencial de estos catalizadores de iridio para promover hidrocarbonaciones asimétricas de otros sistemas insaturados, con el objetivo de acceder de manera directa y asimétrica a esqueletos de productos naturales relevantes, con varios estereocentros.,

[1] a) P. H. Dixneuf, et al., *C-H Bond Activation and Catalytic Functionalization II*, Springer, **2016**.

[2] a) D. F. Fernández, M. Gulías, J. L. Mascareñas, F. López, ***Angew. Chem. Int. Ed.*** **2017**, *6*, 9541-9545. Ver también: b) D. F. Fernández, C. A. B. Rodrigues, M. Calvelo, M. Gulías, J. L. Mascareñas, F. López, ***ACS Catalysis*** **2018**, 7397-7402. c) A. Arribas, M. Calvelo, D. F. Fernandez, C. A. B. Rodrigues, J. L. Mascarenas, F. Lopez, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2021**, *60*, 19297-19305. d) A. Arribas, M. Calvelo, A. Rey, J. L. Mascarenas, F. Lopez, ***Angew. Chem. Int. Ed.*** **2024**, *63*, e202408258. e) A. Rey, A. Arribas, A. Rey, J. L. Mascarenas, F. Lopez, *submitted*.

[3] L. E. Overman *Nature* **2014**, *516*, 181.

[4] Mascarenas, J. L.; Varela, I.; Lopez, F.,. ***Acc Chem Res*** **2019**, 52, 465; b) Marcote, D. C.; Varela, I.; Fernández, J.; Mascareñas, J.; López, F***., J. Am. Chem. Soc***. **2018,** *140*, 16821.

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

MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGANICA
MENCIÓN DE MÁSTER EXCELENTE XUNTA DE GALICIA

PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2025-2026

DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE

Apellidos y nombre del director(es) del proyecto:
MOISÉS GULÍAS COSTA

Cargo: PROFESOR TITULAR DE UNIVERSIDAD

Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto: Química Orgánica. CiQUS - Centro Singular de Investigación en Química Biolóxica e Materiais Moleculares.

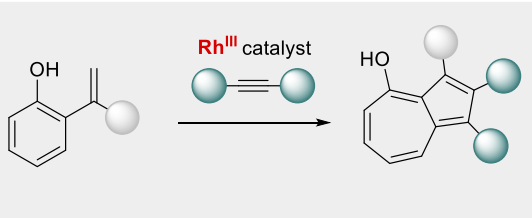
Teléfono directo	**e-mail**
881815790	moises.gulias@usc.es

DATOS DEL PROYECTO

Título: Síntesis de azulenos mediante metodologías de activación C-H con complejos de Rh(III)

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

Los derivados de azuleno presentan propiedades físicas únicas de gran interés en ciencia de materiales, claramente distintas de su isómero isolectrónico, el naftaleno. La estructura del azuleno está compuesta por anillos fusionados de cinco y siete miembros formados por átomos de carbono sp^2. Cuando esta unidad estructural se incorpora en grafeno o en nanocintas de grafeno, actúa como un defecto topológico que modifica significativamente las propiedades electrónicas, magnéticas y estructurales del material.



Por ello, la síntesis de derivados de azuleno constituye un objetivo atractivo en química orgánica sintética, aunque sumamente desafiante, ya que existen pocos métodos eficientes descritos en la literatura.

En este Trabajo Fin de Máster, se propone una síntesis química de tipo bottom-up de azulenos mediante una metodología basada en una secuencia en cascada de activación de enlaces C–H,[1] desaromatización y expansión de anillo de derivados de fenol, catalizada por un complejo metálico de transición.[2] Los azulenos obtenidos se transformarán posteriormente en nanografenos con unidades de azuleno embebidas en su estructura.[3]

1. Por una visión genérica de las reacciones de C-H activación, ver: (a) M. Gulías, José L. Mascareñas, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2016,** *55,* 11000-11019.
2. A. Seoane, N. Casanova, N. Quiñones, J. L. Mascareñas, M. Gulías *J. Am. Chem. Soc.*, **2014**, *136*, 7607-7610
3. Para ejemplos de publicaciones recientes del grupo: (a) MJ. González, X. Vidal, M. Ortuño, J. L. Mascareñas, M. Gulías *J. Am. Chem. Soc.*, **2022**, *144*, 21437–21442 (AMONG MOST VIEWED ARTICLES in JACS in DECEMBER 2022). (b) González, B. Cendón, J. L. Mascareñas, M. Gulías *J. Am. Chem. Soc.*, **2021**, *143*, 3747-3752. (c) A. Seoane, N. Casanova, N. Quiñones, J. L. Mascareñas, M. Gulías, J. *Am. Chem. Soc.* **2014**, 136, 834 (TOP 5 of MOST READ ARTICLES in JACS in JANUARY 2014).

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

MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGANICA
MENCIÓN DE MÁSTER EXCELENTE XUNTA DE GALICIA

PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2025-2026

DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE

Apellidos y nombre del director(es) del proyecto: NAPPI, Manuel	
Cargo: Investigador Ramon y Cajal y CIQUS IP	
Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto: Departamento de Química Organica Centro Singular de Investigación en Química Biolóxica e Materiais Moleculares (CiQUS) Universidade de Santiago de Compostela (USC) Rúa de Jenaro de la Fuente, s/n, 15705 Santiago de Compostela, A Coruña (Lab P1L2)	
Teléfono directo 881815710	**e-mail** manuel.nappi@usc.es

DATOS DEL PROYECTO

Título: Funcionalización fotoquímica de azúcares desprotegidos

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.

En nuestro grupo de investigación se está llevando a cabo el estudio de procesos fotoquímicos que permite la activación y funcionalización de compuestos orgánicos y gases como CO_2. En particular, hemos desarrollado dos metodologías innovadoras para activar alcoholes y acoplar los correspondientes radicales alquilos con piridinas y olefinas, en el contexto de moléculas pequeñas y ADN (Figura A). En el marco de esta línea de investigación, en este proyecto se pretende el desarrollo y la optimización de una metodología fotocatalítica que permita la funcionalización de azúcares desprotegidos (Figura B). Más adelante, esta metodología se utilizará para modificar moléculas orgánicas y fármacos en presencia de ADN en el contexto de bibliotecas químicas codificadas por ADN.

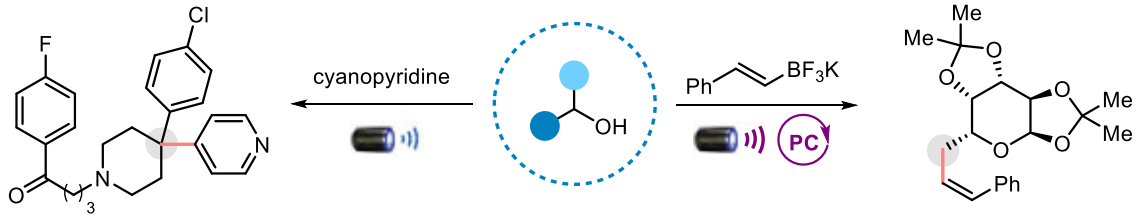
Referencias:

1) S. R. N. Kolusu, I. Sánchez-Sordo, C. Aira-Rodríguez, E. Azzi, M. Nappi* *Nat Commun* **2025**, *16*, 3155.
2) S. R. N. Kolusu, M. Nappi* *Chem. Sci.* **2022**, *13*, 6982–6989

MASTERQO
MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGANICA
MENCIÓN DE MÁSTER EXCELENTE XUNTA DE GALICIA

UAM Universidad Autónoma de Madrid
UNIVERSIDAD COMPLUTENSE MADRID
USC UNIVERSIDADE DE SANTIAGO DE COMPOSTELA
XUNTA DE GALICIA

A) Previous works: photochemical activation and functionalization of alcohols



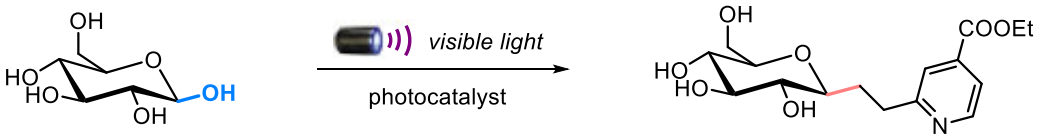
Pyridination ✓ Mild ✓ Metal-free ✓ General *Z*-selective olefination

References

S. R. N. Kolusu, I. Sánchez-Sordo, C. Aira-Rodríguez, E. Azzi, M. Nappi* *Nat Commun* **2025**, *16*, 3155

S. R. N. Kolusu, M. Nappi* *Chem. Sci.* **2022**, *13*, 6982

B) TFM: photochemical functionalization of unprotected sugars



Al principio, el/la alumno/a sintetizará los benzoatos de los azucares. Luego, se controlará la formación del radical alquilo y la funcionalización promovida por la luz visible. Una vez confirmada la formación de los productos deseados, se estudiará la reactividad fotoquímica para optimizar la reacción. En detalle, se ensayarán distintas condiciones de reacción (fotocatalizadores, disolvente, temperatura, aditivos, etc.) con el fin de mejorar el rendimiento del producto de acoplamiento.

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/

MASTERQO
MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGANICA
MENCIÓN DE MÁSTER EXCELENTE XUNTA DE GALICIA

UAM Universidad Autónoma de Madrid
UNIVERSIDAD COMPLUTENSE MADRID
USC UNIVERSIDADE DE SANTIAGO DE COMPOSTELA
XUNTA DE GALICIA

PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2025-2026

DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE

Apellidos y nombre del director(es) del proyecto: Manuel Paz Castañal y Antonio Mouriño Mosquera	
Cargo: TIT y CAT (Emérito)	
Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto: Química Orgánica, USC, Laboratorio de Investigación Ignacio Ribas, Faculta de Química, 15782 Santiago de Compostela	
Teléfono directo **881814218**	**e-mail** **manuel.paz@usc.es**

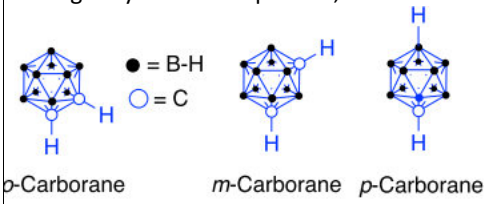
DATOS DEL PROYECTO

Título:

Design and synthesis of vitamin D ligands of the vitamin D transport protein (DBP) for BNCT cancer therapy

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

Dicarba-*closo*-dodecaboranes (carboranes) (Fig 1) are carbon-boron clusters with icosahedral geometry with unique properties such as thermal and metabolic stability and high lipophilicity.[1] Carboranes have found applications as bulky pharmacophores in biologically active compounds, as anticancer agents, as inhibitors, as building blocks for material science and/or as boron carriers for boron neutron capture therapy (BNCT).[2] The objective of this technique is to selectively destroy cancer especially in cases of incurable cancers. The ^{10}B nuclei capture neutrons to form unstable ^{11}B atoms whose fission produces $^{4}He^{2+}$, $^{7}Li^{3+}$ nuclei, gamma rays and excess of kinetic energy that destroy the tumor cells in a very small radius. The development of this technique depends mainly on the availability of compounds that have affinity for tumors or that can be selectively transported to tumors. Therefore, boron-polyhedric clusters constitute pharmacophores of interest for the development and supply of new boron-containing materials for BNCT therapy.[3] To date, gold nanoclusters containing polyhedric derivatives of ^{10}B have been developed for bio-imaging of cancer cells and targeted delivery of ^{10}B material to tumors.[4] The affinity for the tumor could be improved by introducing receptor ligands that are overexpressed in tumors. The vitamin D nuclear receptor (VDR) is expressed in many tumors and its ligand, the hormone 1α,25-dihydroxyvitamin D_3 (**1a**, Fig. 2), shows anticancer actions.[5] This hormone is formed at the kidney by enzymatic hydroxylation of 1a-hydroxy-vitamin D_3 metabolite (**1b**), which is transported to the kidney by the vitamin D_3 binding protein (DBP). The X-ray structure of DBP shows that the 25-OH group of **1b** binds to the surface of the protein through the convex face of the CD-ring, with the C18-methyl group located far away from the protein. Therefor we chose this position to functionalize **1b** and synthesize **1c**, which incorporates three *o*-carboranyl units[6] and should be transported to the kidney by the DBP for NBCT therapy of kidney-tumors.



Objectives of this project: (a) Preparation of Inhoffen-Lythoge diol (**6**) by ozonolysis of vitamin D_2; (b) Long distance functionalization of **6** to prepare tetraacetate **5**; (c) Acetalyzation of **5** and inversion of configuration at C8 to form the protected hydroxy-acetal **4**; (d) Synthesis of protected vitamin D analogue **2** through ketone **3**.

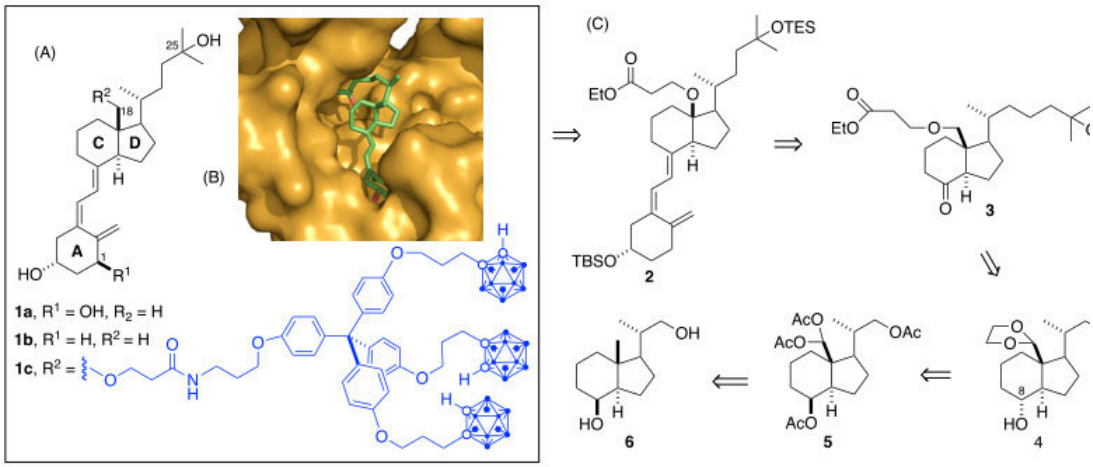


Figure 2. (A) Structures of 25-hydroxyvitamin D_3, 1,25-dihydroxyvitamin D_3 metabolites, and target DBP-ligand **1c**. (B) X-ray of binding pose of the complex **1b**-DBP. (C) Retrosynthesis of target **1c**.

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

Experiencia (TFG) en síntesis orgánica

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

The student will gain experience in organic synthesis techniques including inert atmosphere, chromatography (TLC, Column, HPLC), protecting groups, basic organic reactions (oxidation-reduction, protection-deprotection, formation of C-C bonds), structural analysis (NMR, MS, etc), chemical software (chemoffice , docking studies)

MASTERQO
MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGANICA
MENCIÓN DE MÁSTER EXCELENTE XUNTA DE GALICIA

UAM Universidad Autónoma de Madrid
UNIVERSIDAD COMPLUTENSE MADRID
USC UNIVERSIDADE DE SANTIAGO DE COMPOSTELA
XUNTA DE GALICIA

PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2025-2026

DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE

Apellidos y nombre del director(es) del proyecto:
Mª Dolores Pérez Meirás e Iago Pozo Míguez

Cargo:
Catedrática e Investigador Postdoctoral Marie Curie

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 Departamento de Química Orgánica, Universidade de Santiago de Compostela, 15782 España.

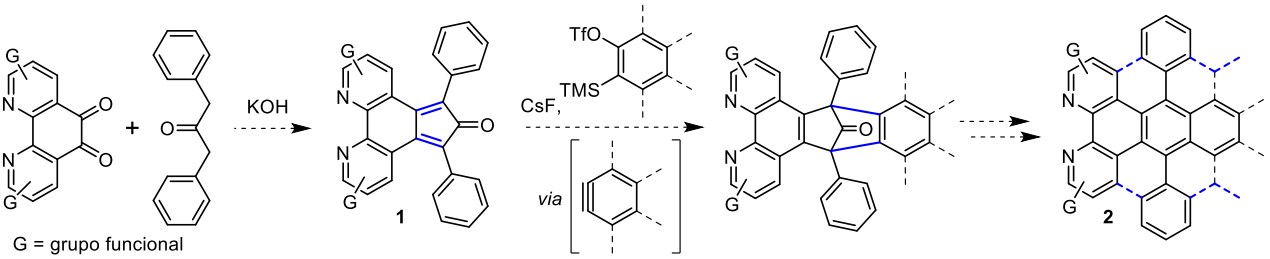
Teléfono directo	**e-mail**
(+34) 8818 15717 & (+34) 8818 15751	dolores.perez@usc.es & iago.pozo.miguez@usc.es

DATOS DEL PROYECTO

Título: Síntesis de nanografenos nitrogenados mediante el uso de ciclopentadienonas

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

La síntesis de hidrocarburos policíclicos aromáticos (HPAs) y nanografenos constituye un desafío científico de gran interés debido a sus propiedades físicas. En particular, los compuestos que incorporan átomos de nitrógeno presentan propiedades optoelectrónicas que los convierten en prometedores candidatos como componentes de dispositivos electrónicos como transistores de efecto de campo orgánico (OFETs) y diodos emisores de luz orgánicos (OLEDs).[1] Este proyecto tiene como objetivo el desarrollo sintético de una ciclopentadienona nitrogenada y el estudio de su reactividad como dieno en reacciones de cicloadición [4+2] con arinos y bisarinos.



El potencial de la 1,10-fenantrolin-ciclopentadienona (**1**) como plataforma de acceso a hidrocarburos aromáticos policíclicos es incuestionable. No obstante, su inclusión en dos patentes hasta la fecha ha limitado el desarrollo de investigaciones en este ámbito. En este contexto, se propone explorar nuevas rutas sintéticas para la obtención del compuesto **1**, así como su aplicación en la preparación de nanografenos nitrogenados (**2**).

1) Z. Li, Y. Bu, S. Xie, Y. Ni, K. Yang, Z. Zeng. *Chem. Mater.* **2024**, *36*, 3058−3080.

2) a) B. Y. Kim, J. B: Ahn. Fused aromatic electron transporting compound for organic electroluminescent device. KR. Patente KR2014046975 A, **2014**. b) X. Song, N. Xu. Preparation of nitrogen-containing spiro compounds as light-emitting layer for OLEDs. CN. Patent CN118255765 A, **2024**.

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

Idealmente, la persona encargada de este proyecto debe ser una entusiasta del laboratorio, ya que la mayor parte del trabajo es sintético. El estudio de las propiedades puede alcanzar áreas del conocimiento tradicionalmente agrupadas en química inorgánica o química física, por lo que se espera una actitud positiva hacia el aprendizaje multidisciplinar.

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

Se espera que la persona sea responsable, disciplinada y automotivada. Este proyecto permite trabajar en química orgánica y profundizar en otras disciplinas (en primera persona y mediante colaboraciones), por lo que representa una gran oportunidad para una persona ambiciosa que desee ampliar su formación de cara su futuro académico, p. ej. realización de doctorado.

MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGANICA
MENCIÓN DE MÁSTER EXCELENTE XUNTA DE GALICIA

PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2025-2026

DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE

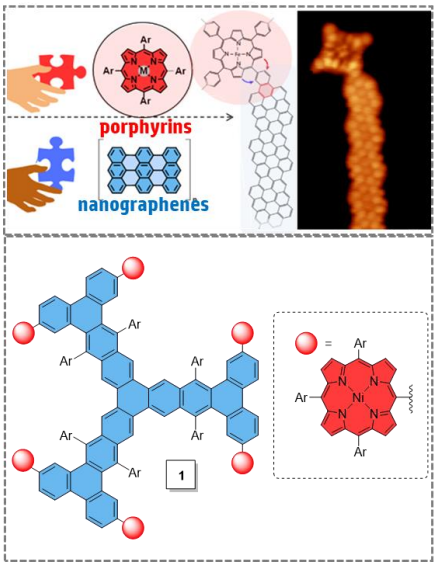
Apellidos y nombre del director(es) del proyecto: Diego Peña Gil y Ana Rita Monteiro	
Cargo: Catedrático e Investigadora Postdoctoral Marie Curie	
Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto: Departamento de Química Orgánica y CiQUS, Universidade de Santiago de Compostela. El proyecto se desarrollará en **CiQUS**. *C/ Jenaro de la Fuente s/n (esquina con Avda. Mestre Mateo), Campus Vida, 15782 Santiago de Compostela, España*	
Teléfono directo +34 8818 15718	**e-mail** diego.pena@usc.es; anarita.rodriguesvillares@usc.es

DATOS DEL PROYECTO

Título: Nuevos materiales moleculares π-extendidos: integración de porfirinas en arquitecturas nanografénicas

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

El objetivo de este proyecto es sintetizar nuevas nanoestructuras híbridas de porfirinas y nanografenos,[1,2] explorando diversas metodologías de acoplamiento entre porfirinas y derivados de hidrocarburos aromáticos policíclicos (PAHs), aprovechando la experiencia del grupo de investigación COMMO. Se propone la síntesis de la estructura híbrida **1** a partir de la ciclotrimerización de arinos, seguida del acoplamiento con porfirinas mediante reacciones de Suzuki-Miyaura. Se llevará a cabo una caracterización exhaustiva de las nuevas estructuras obtenidas por de técnicas como RMN, espectrometría de masas, espectroscopía UV-Vis y fluorescencia, voltamperometría cíclica. Se estudiará el efecto de diferentes metales centrales en las porfirinas sobre las propiedades electrónicas y estructurales de los híbridos. Finalmente, los híbridos desarrollados serán estudiados con el objetivo de identificar las propiedades y arquitecturas moleculares más prometedoras para su aplicación futura en materiales sensores.



1) C. Moreno *et al.*, *Science* **2018**, *360*, 199. 2) L. M. Mateo *et al.*, *Chem. Sci.* **2021**, *12*, 247.

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

Para el correcto desarrollo de este proyecto, se recomienda que el estudiante cuente con: a) conocimientos sólidos de química orgánica, b) experiencia práctica en síntesis orgánica en disolución, c) conocimientos básicos en caracterización estructural y espectroscópica, d) capacidad de trabajo riguroso, organización en el laboratorio y habilidades para el análisis crítico de resultados. Se valorará positivamente la motivación por integrarse en un entorno de investigación internacional y multidisciplinar.

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

Este trabajo se enmarca en los proyectos europeos ERC Synergy Grant MolDAM y MSCA-PF GRAPHYRIN, que ofrecen un entorno científico avanzado y multidisciplinar para el desarrollo del proyecto.

MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGANICA
MENCIÓN DE MÁSTER EXCELENTE XUNTA DE GALICIA

PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2025-2026

DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE

Apellidos y nombre del director(es) del proyecto:
Iago Pozo Míguez y Diego Peña Gil

Cargo:
Investigador Postdoctoral Marie Curie e Investigador Oportunius y Catedrático

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 Departamento de Química Orgánica, Universidade de Santiago de Compostela, 15782 España.

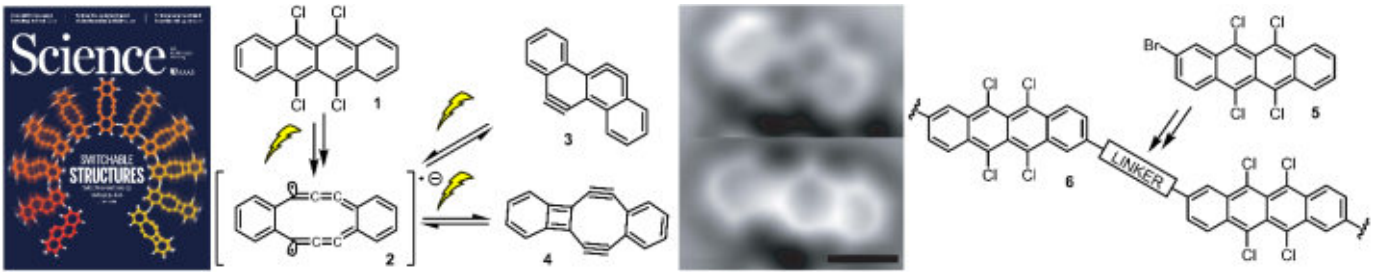
Teléfono directo	**e-mail**
(+34) 8818 15751 & (+34) 8818 15718	iago.pozo.miguez@usc.es & diego.pena@usc.es

DATOS DEL PROYECTO

Título: Diseño y síntesis de moléculas para el estudio de reacciones electroquímicas selectivas a nivel unimolecular

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

En 2022, la colaboración entre la Universidad de Ratisbona (Alemania), IBM Research (Suiza) y nuestro grupo de investigación, consiguió por primera vez la realización de una reacción química selectiva con una única molécula. Este hallazgo se ha publicado en la portada de la revista *Science*.[1] Concretamente, sintetizamos el tetraclorotetraceno **1**. Los enlaces C-Cl de este compuesto se rompieron homolíticamente al aplicarle pulsos de voltaje con un microscopio avanzado, desencadenando reagrupamientos que originaron el intermedio **2**. Desde este anión radical (**2**), fue posible generar los compuestos **3** y **4** de manera selectiva eligiendo el signo y la intensidad de los pulsos eléctricos. A la derecha se muestran imágenes experimentales de microscopía de fuerza atómica (AFM) que permiten visualizar su estructura química (la barra negra en la esquina inferior de la imagen de **4** mide 0.5 nm). El/la estudiante sintetizará oligómeros de **1**. En primer lugar, preparará el compuesto **5** y lo utilizará para sintetizar oligómeros (**6**). Una vez obtenidos, estos productos se analizarán y manipularán mediante microscopías avanzadas.



Este proyecto se enmarca en la ERC Synergy Grant MolDAM,[2] proyecto europeo de máximo prestigio concedido a los grupos de investigación que participan en esta colaboración. En él, pretendemos explorar el alcance y limitaciones de este logro.

1) F. Albrecht, S. Fatayer, I. Pozo, I. Tavernelli, J. Repp, D. Peña, L. Gross Science 2022, 377, 298–301.

2) ERC Synergy Grant MolDAM: https://cordis.europa.eu/project/id/951519/es Grupo COMMO (Guitián, Pérez, Peña) GI-1595.

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

Idealmente, la persona encargada de este proyecto debe ser una entusiasta del laboratorio, ya que la mayor parte del trabajo es sintético. El estudio de las propiedades puede alcanzar áreas del conocimiento tradicionalmente agrupadas en química inorgánica o química física, por lo que se espera una actitud positiva hacia el aprendizaje multidisciplinar.

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

Se espera que la persona sea responsable, disciplinada y automotivada. Este proyecto permite trabajar en química orgánica y profundizar en otras disciplinas (en primera persona y mediante colaboraciones), por lo que representa una gran oportunidad para una persona ambiciosa que desee ampliar su formación de cara su futuro académico, p. ej. realización de doctorado.

MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGANICA
MENCIÓN DE MÁSTER EXCELENTE XUNTA DE GALICIA

PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2025-2026

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: Catedráticos 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 881815720; 881815719	**e-mail** carlos.saa@usc.es; jesus.varela@usc.es

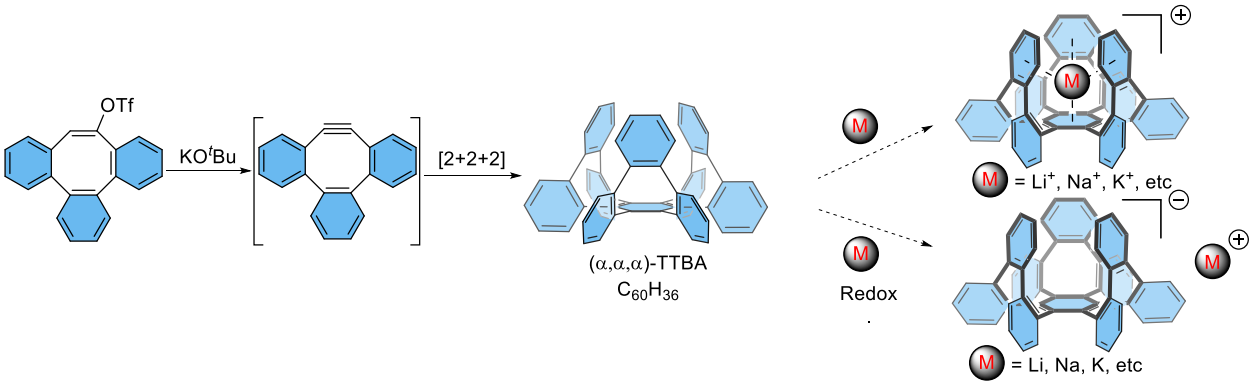
DATOS DEL PROYECTO

Título: Caja de Grafito Cúbico $C_{60}H_{36}$: Estudios de Complejación y Propiedades Redox

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

El grafito cúbico, una estructura hipotética formada por átomos de Csp^2 dispuestos en anillos bencénicos y de ocho miembros, presenta un gran potencial en campos como la superconductividad o las baterías recargables.[1] En nuestro grupo de investigación se ha logrado la síntesis estereodivergente del (α,α,α)-TTBA, un fragmento abierto del grafito cúbico, mediante ciclotrimerización [2+2+2] de tribenzoCOTinos.[2] Este compuesto, con 60 átomos de carbono organizados tridimensionalmente, ha mostrado capacidad para formar complejos de inclusión con cationes como K^+ actuando como ligando π.[2a]

Dada su capacidad para actuar como ligando π y la presencia de anillos COT no aromáticos susceptibles de aromatización por reducción dielectrónica, el objetivo del TFM es estudiar la complejación del (α,α,α)-TTBA con diversos cationes de metales alcalinos y alcalinotérreos, así como explorar sus propiedades redox. El trabajo incluirá síntesis y caracterización de complejos, estudios electroquímicos y, eventualmente, apoyo mediante cálculos teóricos.



Referencias:

[1] (a) Gibson, J.; Holohan, M.; Riley, H. L. *J. Chem. Soc.* **1946**, 456. (b) Baughman, R. H. *Synth. Metals* **1996**, *78*, 339.

[2] (a) Bello-García, J.; Varela, J. A.; Saá, C. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2024**, e202414017. (b) Bello-García, J.; Varela, J. A.; Saá, C. *Chem. Sci.* **2025**,*16*, 10874.

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

Conocimientos/experiencia 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://www.usc.gal/gi1603/saa/

MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGANICA
MENCIÓN DE MÁSTER EXCELENTE XUNTA DE GALICIA

PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2025-2026

DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE

Apellidos y nombre del director(es) del proyecto: Varela Carrete, Jesús Ángel y Saá Rodríguez, Carlos	
Cargo: Catedráticos 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 881815719; 881815720	**e-mail** jesus.varela@usc.es; carlos.saa@usc.es

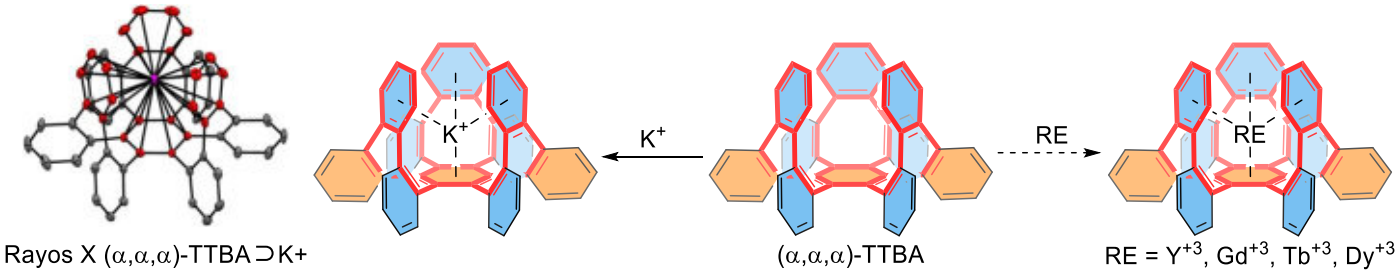
DATOS DEL PROYECTO

Título: Complejos de Tierras Raras (Y, Gd, Tb, Dy) con PAHs Tridimensionales

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

En nuestro grupo de investigación hemos desarrollado recientemente una síntesis estereodivergente del (α,α,α)-TTBA, un fragmento abierto del grafito cúbico, un alótropo teórico de carbono 3D,[1] y analizado su capacidad para coordinar iones metálicos alcalinos como el complejo de inclusión con iones K^+.[2]

En un momento de constante avance tecnológico, la amplia gama de propiedades magnéticas, electroquímicas y fotoquímicas exhibidas por los complejos de tierras raras (RE) (Y, Gd, Tb, Dy) hace que sean muy atractivos para su uso como nuevos materiales luminiscentes/magnéticos, sensores, etc.[3] Ligandos cargados con heteroátomos (carboxilatos, enolatos, etc) son utilizados de forma habitual para preparar este tipo de complejos. Sin embargo, el uso de ligandos con interacciones catión- π han sido objeto de menor atención.[4] En este proyecto de TFM se explorará la síntesis de nuevos complejos del (α,α,α)-TTBA con sales de Y^{+3}, Gd^{+3}, Tb^{+3}, Dy^{+3} así como sus propiedades magnéticas, luminiscentes, etc.



Referencias:

[1] (a) Gibson, J.; Holohan, M.; Riley, H. L. *J. Chem. Soc.* **1946**, 456. (b) Baughman, R. H. *Synth. Metals* **1996**, *78*, 339.

[2] (a) Bello-García, J.; Varela, J. A.; Saá, C. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2024**, e202414017. (b) Bello-García, J.; Varela, J. A.; Saá, C. *Chem. Sci.* **2025**,*16*, 10874.

[3] (a) Hovey, J. L.; Dittrich, T. M.; Allen, M. *J. Rare Earth* **2023**, *41*, 1. (b) Eu: Okayasu, Y.; Yuasa, J. *J. Phys. Chem. Lett.* **2021**, *12*, 6867. (c) Gd: Kanetomo, T.; Naoi, Y.; Enomoto, M. *Eur. J. Inorg. Chem.* **2021**, *2021*, 1130.

[4] (a) Schwarz, N.; Feye, J.; Naina, V. R.; Köppe, R.; Gillhuber, S.; Sun, X.; Roesky, P. W. *JACS Au* **2024**, *4*, 2343.

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

Conocimientos/experiencia 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://www.usc.gal/gi1603/saa/

MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGANICA
MENCIÓN DE MÁSTER EXCELENTE XUNTA DE GALICIA

PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2025-2026

DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE

Apellidos y nombre del director del proyecto: M. Eugenio Vázquez	
Cargo: Catedrático	
Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto: Dept. Q. Orgánica, USC. CiQUS. Jenaro de la Fuente sn., Campus Vida. 15782 Santiago de Compostela.	
Teléfono directo: 881815738	**e-mail:** *eugenio.vazquez@usc.es*

DATOS DEL PROYECTO

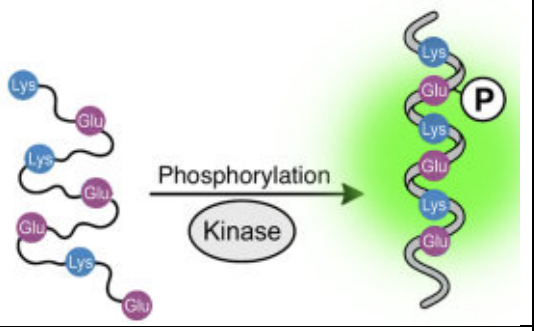
Título: Sensores de kinasas a través de Fluorescencia No Aromática (GlowSticks)

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

Desde la década de 1950, se asume que la fluorescencia de las proteínas resulta exclusivamente de la presencia de grupos aromáticos en grupos prostéticos (por ejemplo, riboflavina, NADPH) o en sus residuos (Phe, Tyr, Trp). Sin embargo, en contra de este paradigma clásico, diversos estudios han descrito la fotoluminiscencia en el estado agregado de proteínas y péptidos que carecen de funcionalidades aromáticas o conjugadas, un fenómeno denominado fluorescencia no aromática (NAF, por sus siglas en inglés) (*1*). Nuestro interés en el estudio de este fenómeno nos ha llevado a explorar su potencial para el desarrollo de sensores fotoluminiscentes y más concretamente, el estudio de la fosforilación por kinasas.

La fosforilación es una modificación postraduccional (PTM) clave, consistente en la unión covalente de un grupo fosfato a cadenas laterales de aminoácidos específicos por acción de enzimas quinasas. Esta PTM regula numerosas rutas de señalización celular, incluyendo metabolismo, proliferación, crecimiento y diferenciación celular, por lo que el desarrollo de sensores que permitan el estudio de esta PTM es un objetivo central en química biológica (*2*). La fosforilación puede modular la función proteica mediante la inducción de cambios conformacionales, afectando tanto la flexibilidad de bucles como la estabilidad de estructuras secundarias. En particular, su efecto sobre la estabilidad de las α-hélices depende críticamente de la posición del residuo fosforilado: mientras que la fosforilación en el interior o extremo C-terminal tiende a desestabilizar la hélice, la fosforilación en el extremo N-terminal puede favorecer su formación, estabilizando regiones inicialmente desordenadas (*3*).

Recientemente nuestro grupo ha descrito por primera vez la emisión NAF de péptidos diseñados basados en el motivo de α-hélice simple (SAHs), formado por repeticiones de cuatro residuos aniónicos (Glu) y cuatro catiónicos (Lys/Arg) $[E_4(K/R)_4]_n$ (*4*), también demostramos que las interacciones intramoleculares entre las cadenas laterales Lys/Glu son determinantes para la aparición de NAF, y que la intensidad de emisión de estos péptidos se correlaciona con su contenido en estructura de α-hélice (8). A partir de estos hallazgos, planteamos que el **plegamiento de α-hélices inducido por fosforilación** puede aprovecharse para generar un aumento en la NAF, lo que permitiría utilizar estas secuencias como **sensores de actividad quinasa** basados en fluorescencia intrínseca, sin necesidad de etiquetas externas.(*5*).



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

No se requieren conocimientos previos específicos del proyecto, sólo tener interés en el campo de la química biológica y los sensores fluorescentes. Se proporcionará formación teórica/práctica en las técnicas básicas del proyecto, incluyendo síntesis de péptidos en fase sólida, HPLC, y espectroscopía de dicroísmo circular y de fluorescencia.

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

GlowSticks es una propuesta de largo recorrido que podría tener continuación en una tesis. El horario es flexible y adaptado a las necesidades académicas del estudiante.

1. H. Zhang, B. Z. Tang, Through-Space Interactions in Clusteroluminescence. *JACS Au* **1**, 1805–1814 (2021).
2. M. D. Shults, D. Carrico-Moniz, B. Imperiali, Optimal Sox-based fluorescent chemosensor design for serine/threonine protein kinases. *Anal. Biochem.* **352**, 198–207 (2006).
3. M. Batchelor, R. S. Dawber, A. J. Wilson, R. Bayliss, α-Helix stabilization by co-operative side chain charge-reinforced interactions to phosphoserine in a basic kinase-substrate motif. *Biochem. J* **479**, 687–700 (2022).
4. S. Sivaramakrishnan, B. J. Spink, A. Y. L. Sim, S. Doniach, J. A. Spudich, Dynamic charge interactions create surprising rigidity in the ER/K alpha-helical protein motif. *Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A.* **105**, 13356–13361 (2008).
5. C. González-González, R. Lopez-Blanco, J. A. González-Vera, S. D'Ingiullo, D. Bouzada, M. Melle-Franco, A. Orte, M. E. Vázquez, Non-aromatic fluorescence from single α-helical peptides. *Cell Rep. Phys. Sci.*, 102631 (2025).

Máster Interuniversitario en Química Orgánica

Relación de Trabajos de Investigación (30 ECTS) ofertados por el Centro de Investigaciones Biológicas (CIB, CSIC)

Curso Académico 2025-2026

Director(es)	Título del Proyecto
Rodríguez, J.L.	Mecanismos moleculares usados por el receptor de quimioquinas CCR7 para controlas las funciones de las células dendríticas

MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGANICA
MENCIÓN DE MÁSTER EXCELENTE XUNTA DE GALICIA

PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2025-2026

DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE

Apellidos y nombre del director(es) del proyecto: José Luis Rodríguez Fernández	
Cargo: Investigador Científico	
Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto: Biomedicina	
Teléfono directo: 34-837-3112 Ext 442702	**e-mail** rodrifer@cib.csic.es

DATOS DEL PROYECTO

Título: Mecanismos moleculares usados por el receptor de quimioquinas CCR7 para controlas las funciones de las células dendríticas

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

Las células dendríticas (CDs) juegan un papel clave en la regulación de la respuesta inmune adaptativa. Esta respuesta está relacionada con la activación de los linfocitos T (LT), que combaten a los patógenos en zonas infectadas. Para llevar a cabo la respuesta inmune adaptativa, las CDs deben migrar a los ganglios linfáticos, donde presentarán antígenos y activarán a los LT, que posteriormente migrarán a la región infectada. El receptor quimiotáctico CCR7 juega un papel central en el sistema inmune, ya que funciona como una "brújula molecular" que dirige a las CDs hacia los ganglios linfáticos, donde se encuentran sus ligandos CCL19 y CCL21. Interesantemente, aparte de la direccionalidad (i.e., la quimiotaxis), CCR7 regula otras funciones celulares de las CDs: su supervivencia, la dinámica de la actina —que a su vez regula la velocidad migratoria—, la endocitosis, la citoarquitectura y el metabolismo (glucólisis y fosforilación oxidativa). Considerando la crucial importancia de CCR7 para el inicio de la respuesta inmune adaptativa, el conocimiento de los mecanismos que permiten regular las funciones de las CDs descritas es muy importante para modular dicha respuesta. Hemos observado que CCR7 utiliza módulos de señalización altamente independientes para regular la supervivencia, la quimiotaxis y la dinámica de la actina (Rodríguez-Fernández JL, Criado-García O. (2020) Front Immunol. 11:528). El objetivo de este proyecto de TFM es obtener información acerca del módulo de señalización que regula la dinámica de la actina. Aunque se conocen muchos de los componentes moleculares utilizados por CCR7 para controlar esta dinámica, existe poca información sobre los cambios en las interacciones de estas moléculas en el espacio tridimensional (3D) intracelular tras la estimulación de CCR7. ¿Se producen acercamientos o asociaciones entre estas moléculas que permitan regular las funciones de CCR7 (migración, endocitosis, citoarquitectura)? Para abordar este estudio, analizaremos mediante técnicas de microscopía las interacciones entre estas moléculas. Además, basándonos en la información disponible sobre la estructura 3D de las moléculas analizadas, intentaremos obtener un modelo tridimensional de los cambios moleculares que se producen en el módulo de señalización que, tras la estimulación de CCR7, regulan la dinámica de la actina. Este tipo de aproximación no se ha realizado hasta el momento, por lo que sería de gran interés. El conocimiento de los mecanismos moleculares que utiliza CCR7 para regular la dinámica de la actina, además de contribuir a una mejor comprensión de la respuesta inmune, puede ser útil para la optimización de protocolos que utilizan CDs en terapias antitumorales o en la respuesta a diferentes amenazas, incluidos patógenos como los virus.

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

Experiencia previa de trabajo en el laboratorio,

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

Información adicional sobre el trabajo desarrollado en nuestro laboratorio (https://pubmed.ncbi.nlm.nih.gov/?term=Rodriguez-Fernandez+JL&sort=date&size=100). El fin de este trabajo es obtener datos para una publicación en una revista científica. Por supuesto, el estudiante que participe en este trabajo figurará como autor en la publicación que enviemos.

Máster universitario en Química Orgánica (M60)

Relación de Trabajos de Investigación ofertados en INSTITUTO DE CIENCIA DE MATERIALES DE MADRID (ICMM, CSIC)

CURSO ACADÉMICO 2025-2026

Director(es)	Título del proyecto
IGLESIAS HERNANDEZ, Marta	*Materiales orgánicos basados en unidades de construcción biobasadas y su aplicación como catalizadores multifuncionales*
RUIZ CARRETERO, Amparo	*Síntesis y caracterización de semiconductores supramoleculares quirales para estudios de selectividad de espín*
MAYA HERNÁNDEZ, Eva María	*Desarrollo de Catalizadores Poliméricos Innovadores mediante Mecanoquímica para la Producción Sostenible de Biodiesel*
UDDIN, Mohammad Afsar	*Diseño, Síntesis y Estrategias de Dopaje para Semiconductores Orgánicos de Alto Rendimiento en Electrónica Flexible*
UDDIN, Mohammad Afsar	*Optimización de Fotocatalizadores Orgánicos para la Producción Sostenible de Hidrógeno mediante División del Agua con Energía Solar*
GARCÍA FRUTOS, Eva M. / PASCUAL GONZÁLEZ, Cristina	*Preparación y caracterización de nuevos materiales compuestos orgánicos mecanoluminiscentes*
MAVRANTONAKIS, Andreas	*Diseño computacional de materiales nanoporosos para la captura de contaminantes orgánicos persistentes en agua*
GÓMEZ-LOR PÉREZ, Berta	*Materiales inteligentes orgánicos y sus aplicaciones en tintas de seguridad*

PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2025-2026

DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE

Apellidos y nombre del director(es) del proyecto: Iglesias Hernandez Marta	
Cargo: Investigador Científico	
Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto: Materiales supramoleculares, poliméricos y reticulares. Instituto de Ciencia de Materiales de Madrid. CSIC	
Teléfono directo 913349032	**e-mail** marta.iglesias@icmm.csic.es

DATOS DEL PROYECTO

Título: Materiales orgánicos basados en unidades de construcción biobasadas y su aplicación como catalizadores multifuncionales

Title: Organic materials based on bio-based building units and their application as multifunctional catalysts

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 integren unidades estructurales singulares normalmente no empleadas en la síntesis de catalizadores convencionales, es esencial para el desarrollo de sólidos selectivos y multifuncionales. La organización de estos sólidos porosos en entramados estructurales bi- y/o tridimensionales con funcionalidades específicas constituye un factor clave para la obtención de materiales avanzados, difíciles de lograr mediante técnicas tradicionales.

El proyecto propuesto se centra en la obtención de materiales porosos orgánicos que incorporen unidades estructurales biobasadas, combinadas con unidades de triazina, imidas y grupos aromáticos fluorados, con el objetivo de ser aplicados en procesos sostenibles.

Actividades a realizar:

Síntesis y caracterización estructural de las unidades moleculares aisladas.

Síntesis y caracterización (a nivel molecular y del sólido) de los materiales obtenidos, empleando métodos sostenibles como la mecanoquímica y la síntesis asistida por microondas.

Evaluación de la actividad catalítica de los materiales en procesos sostenibles, como la transformación de biomasa o el aprovechamiento de CO_2.

Estudio de las propiedades de los materiales como sensores para la detección de contaminantes.

Competencias a desarrollar:

Introducción a la investigación científica en el ámbito de la síntesis de nuevos materiales y su aplicación en procesos sostenibles.

Manejo de bases de datos científicas.

Trabajo en equipo y desarrollo de autonomía en la ejecución de actividades experimentales.

Aplicación de metodologías sintéticas y técnicas de caracterización físico-química de materiales, así como interpretación de resultados.

Fomento de la responsabilidad, la iniciativa y la capacidad de aprendizaje.

Capacidades y conocimientos recomendables que debe tener el estudiante para la realización de este proyecto **Los adquiridos en el grado**
Indíquese cualquier otra aclaración que se considere que pueda ayudar a los estudiantes en la elección del TFM El o la estudiante desarrollará 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).

MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGANICA
MENCIÓN DE MÁSTER EXCELENTE XUNTA DE GALICIA

PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2025-2026

DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE

Apellidos y nombre del director(es) del proyecto: RUIZ CARRETERO, Amparo	
Cargo: Investigadora ATRAE	
Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto: Instituto de Ciencia de Materiales de Madrid (ICMM-CSIC), Calle Sor Juana Inés de la Cruz 3, Cantoblanco 28049, Madrid	
Teléfono directo 917166065-437302	**e-mail** **amparo.ruiz@ics-cnrs.unistra.fr**

DATOS DEL PROYECTO

Título: Síntesis y caracterización de semiconductores supramoleculares quirales para estudios de selectividad de espín

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

Introducción: El consumo de energía mundial ha experimentado un crecimiento vertiginoso debido al aumento de la población y al desarrollo económico global. Este fenómeno plantea desafíos colosales: **la necesidad urgente de desarrollar fuentes de energía sostenibles, reducir nuestra dependencia de combustibles fósiles y mitigar el impacto ambiental de esta creciente demanda.** En este sentido, la energía solar es actualmente el sector de las energías renovables de más rápido crecimiento en la UE, lo que ha dado lugar a cifras récord de instalaciones anuales en los últimos 3 años (alrededor de 28 GW en 2021, 41 GW en 2022 y 56 GW en 2023). En particular, las tecnologías basadas en el silicio, debido a su coste razonable y su alta eficiencia (27,6% en silicio monocristalino), dominan el mercado solar comercial. Además, materiales como los dispositivos basados en perovskitas (25% de eficiencia) y las células de arseniuro de galio (GaAs) demuestran una alta eficiencia prometedora. Sin embargo, estas últimas tecnologías no están exentas de problemas que frenan su implantación a gran escala, ya que incluyen materiales tóxicos para los que actualmente se están desarrollando alternativas. Por otro lado, **los materiales orgánicos**, como los polímeros y las moléculas discretas, no suelen ser tóxicos y han mostrado un gran potencial debido a su capacidad de ser procesados en disolución, permitiendo la fabricación de células solares mediante técnicas de impresión y recubrimiento a bajo coste. Estos materiales también permiten la creación de células solares ligeras y flexibles, adecuadas para aplicaciones en superficies curvas y dispositivos portátiles. Sin embargo, la eficiencia actual de los dispositivos fotovoltaicos orgánicos (OPVs) está lejos del límite teórico de eficiencia (~30%). A pesar de los avances logrados en este campo, **algunos problemas clave, como la recombinación de cargas, dificultan la competitividad de los dispositivos orgánicos fotovoltaicos como tecnología**. Más concretamente, **estos problemas provienen de la dificultad para obtener la morfología apropiada de los dispositivos. En este proyecto, nos centramos en aplicar estrategias de química supramolecular**, concretamente estructuras quirales supramoleculares, para resolver estos problemas. Para ello, exploraremos **el efecto de selectividad de espín inducido por la quiralidad (CISS) para resolver dichos problemas**.

Objetivos: en este proyecto, los objetivos generales son **1) controlar la morfología de las nanoestructuras orgánicas mediante estrategias de química supramolecular**, y **2) utilizar el transporte de carga selectivo por espín en nanoestructuras supramoleculares quirales**. Estos dos enfoques combinados tienen el potencial de mejorar enormemente la eficiencia de dispositivos orgánicos fotovoltaicos.

Los objetivos específicos son: 1) Síntesis de materiales D y A quirales con enlaces de hidrógeno adecuados para un posterior proceso de polimerización supramolecular estereoselectiva que dé lugar a dominios autoordenados. Este objetivo incluye el análisis de las propiedades de autoensamblaje, transporte de carga y filtración de espín de cada componente individual. 2) Polimerización supramolecular estereoselectiva con los materiales D y A seleccionados. Los estudios mecanísticos son el

objetivo principal de esta parte del proyecto. 3) Fabricación de películas delgadas con estructuras D/A autoclasificadas, seguidas de mediciones del efecto CISS, y fabricación de dispositivos OPV para evaluar su eficiencia global, y correlacionar los resultados con las mediciones de selectividad de espín

En particular, el TFM se centrará en los objetivos 1 y 2, incluyendo la síntesis y caracterización del material quiral aceptor (A).

1) Síntesis, autoasemblaje, transporte de carga, selectividad de espín

2) Polimerización supramolecular estereoselectiva

3) Estudio en capa fina, fabricación de dispositivos y correlación con la selectividad de espín

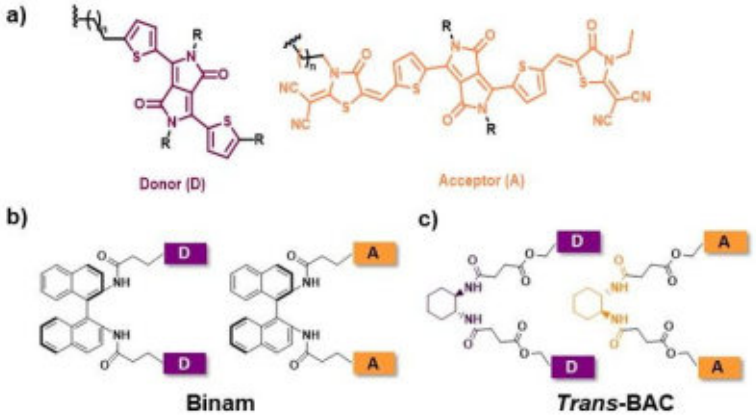
Contenido del proyecto:

Numerosas investigaciones han demostrado que los electrones con espín específico pueden atravesar preferentemente ensamblajes quirales de una lateralidad determinada (levógira o dextrógira), incluso en ausencia de campos magnéticos externos. Dado que las células solares orgánicas dependen de la formación de portadores de carga (positivos y negativos, que son especies con espín), canalizarlos a lo largo de ensamblajes quirales puede evitar eficazmente los encuentros entre cargas de signo opuesto, mejorando así la eficiencia del dispositivo.

Este proyecto se centra principalmente en desarrollar estrategias alternativas para crear materiales sostenibles aplicables a tecnologías energéticas. El proyecto se enfoca en usar la química supramolecular para obtener la morfología ideal de la capa activa **D/A** de celdas fotovoltaicas orgánicas y utilizar el efecto de selectividad de espín inducido por la quiralidad (efecto CISS), para reducir la recombinación de cargas, y así hacer estos materiales más sostenibles y competitivos. El efecto CISS se identificó en 1999 por R. Naaman y colaboradores, y dice que las moléculas quirales pueden transportar electrones (con espín hacia arriba o hacia abajo) de forma selectiva bajo iluminación. Para su estudio, se expusieron láminas de oro cubiertas de aminoácidos de quiralidad opuesta a un láser, que hace que el oro expulse electrones debido al efecto fotoeléctrico. Desde entonces, el efecto CISS se ha estudiado en ADN/oligopeptidos, perovskitas, polímeros, materiales reticulares y en alquenos superpoblados. Recientemente, ejemplos muy interesantes han demostrado cómo el transporte selectivo de espín en ensamblajes quirales da lugar a nuevos comportamientos en tecnologías sostenibles.

Tareas a realizar:

- Estudio bibliográfico de mecanismos de polimerización supramolecular que incluyan autosegregación de componentes dadores y aceptores.
- Síntesis de moléculas aceptoras basadas en dicetopirrolopirrol y rodanina. Nos basaremos en los resultados anteriores del grupo sobre moléculas pequeñas con tiempos de vida largos de los portadores de carga para reducir la recombinación, y materiales con enlaces de hidrógeno utilizados anteriormente en la fabricación de dispositivos fotovoltaicos. La síntesis se realizará mediante irradiación con microondas y en condiciones libres de disolventes, y la purificación mediante cromatografía de permeación en gel de reciclaje para reducir la cantidad de disolvente. Una vez sintetizados los segmentos electroactivos, incorporaremos las unidades de enlace de hidrógeno. Como novedad, acoplaremos los segmentos electroactivos a bloques de autoensamblaje enantiopuros con enlaces de hidrógeno, como la 1,1'-binaftil-2,2'-diamina (Binam) y el trans-1,2-bis(amido)ciclohexano (trans-BAC). Dichos bloques se han utilizado previamente para realizar procesos de polimerización supramolecular estereoselectiva. El acoplamiento del segmento semiconductor a los bloques de autoensamblaje (Binam y trans-BAC) se realizará según las condiciones descritas en la literatura.



- En una segunda parte se estudiarán las propiedades de autoensamblaje, transporte de carga y selectividad de espín: estos estudios se realizarán en disolución y en lámina delgada. Utilizaremos espectroscopias UV-Vis y de dicroísmo circular (CD) con temperatura y concentración variables para seguir el proceso de autoensamblaje de los materiales D y A por separado. A partir de los estudios UV obtendremos información sobre la concentración mínima para formar agregados, y las temperaturas a las que se obtienen especies ensambladas frente a no ensambladas. Se calculará el bandgap óptico y sus variaciones tras la agregación. Utilizaremos la voltamperometría cíclica para evaluar los niveles de energía de los orbitales frontera. Con espectroscopia CD seguiremos el proceso de polimerización supramolecular de estructuras quirales, se harán en paralelo a las medidas de absorción y utilizando las mismas condiciones de preparación de la muestra. La magnitud de la señal de CD está fuertemente correlacionada con valores más altos de filtración de espín y, por lo tanto, seleccionaremos los derivados A y D que muestren la señal de CD más intensa. Las medidas de Infrarrojo por Transformada de Fourier (FTIR) y Resonancia Magnética Nuclear (RMN) a temperatura y concentración variables nos ayudarán a completar los estudios mecanísticos de la polimerización supramolecular de cada componente. Además, se explorará el empaquetamiento molecular en película delgada. Tras dilucidar el mecanismo de autoensamblaje, exploraremos las propiedades de transporte de carga y la selectividad de espín a través de colaboraciones en el ICMM e internacionales.

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

- Conocimiento de química orgánica y síntesis, aunque el/la estudiante recibirán el entrenamiento adecuado durante el TFM, incluyendo técnicas de purificación y caracterización
- Conocimientos de química supramolecular
- Conocimiento básico de espectroscopía de absorción, infrarrojo, dicroísmo circular
- Conocimiento básico de microscopía de fuerza atómica (AFM)
- Conocimientos básicos de dispositivos electrónicos y fotovoltaicos

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

Como se ha indicado en el apartado anterior, es muy beneficioso tener los conocimientos indicados, aunque el estudiante/a será adecuadamente formado en síntesis y caracterización de compuestos orgánicos y en estructuras supramoleculares.

Hasta el 31 de agosto soy investigadora permanente del CNRS (equivalente francés al CSIC), Llevo 2 años como investigadora visitante en el Instituto de Ciencia de Materiales de Madrid (ICMM-CSIC) junto con una parte de mi grupo en Francia. El 1 de septiembre empieza oficialmente mi proyecto ATRAE, para la atracción y retención de talento consolidado. El estudiante/a se incorporará a un nuevo grupo de investigación del ICMM formado por parte de mi grupo anterior en Estrasburgo (Francia) formado por una postdoc y una estudiante de doctorado y por parte del proyecto ATRAE, habrá 2 investigadores postdoctorales más, asegurando la supervisión continuada del estudiante. Por mi parte, hago seguimiento diario del trabajo de laboratorio y nos reunimos como grupo una vez a la semana para presentar los resultados. De esta forma, el estudiante también recibirá formación para mejorar la presentación y discusión de resultados.

Tenemos nuevo espacio de laboratorio equipado para hacer síntesis y contamos con los equipos de caracterización necesarios para llevar a cabo el proyecto propuesto.

Por otra parte, el estudiante se encontrará en un grupo internacional, con investigadores españoles y de varios países, con lo que también se ofrece un ambiente investigador muy enriquecedor.

MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGANICA
MENCIÓN DE MÁSTER EXCELENTE XUNTA DE GALICIA

PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2025-2026

DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE

Apellidos y nombre del director(es) del proyecto: Eva M Maya	
Cargo: Investigadora	
Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto: Departamento de Frontera en Química de Materiales, Instituto de Ciencia de Materiales de Madrid (ICMM), Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC) ; c/Sor Juana Inés de la Cruz 3, Cantoblanco, Madrid 28049.	
Teléfono directo 34 91 3349047	**e-mail eva.maya@csic.es**

DATOS DEL PROYECTO

Título: Desarrollo de Catalizadores Poliméricos Innovadores mediante Mecanoquímica para la Producción Sostenible de Biodiesel

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

La producción de biodiesel es un pilar fundamental en la transición hacia una energía más sostenible, contribuyendo a la reducción de la dependencia de los combustibles fósiles y la disminución de las emisiones de gases de efecto invernadero. Al aprovechar materias primas renovables como aceites vegetales, el biodiesel desempeña un papel crucial en la descarbonización del sector energético. Sin embargo, los catalizadores tradicionales utilizados en su producción, ya sean de naturaleza básica, ácida o enzimática, presentan mucho desafíos todavía, como altos costos, limitaciones en la reutilización, baja eficiencia en condiciones específicas y la formación de subproductos no deseados.

Con el fin de optimizar este proceso, es esencial avanzar hacia catalizadores más sostenibles y eficientes. En este contexto, este TFM propone el desarrollo de **catalizadores innovadores basados en polímeros hiperreticulados**, los cuales ofrecen una mayor **estabilidad** y **capacidad de reciclaje** que se sintetizarán mediante **mecanoquímica**, un proceso ecoeficiente que favorece la producción rápida de materiales sin necesidad de disolventes y con un bajo impacto ambiental. Se tratará de incorporar **grupos fluorescentes** que permita también utilizarlos como **fotocatalizadores**. Este enfoque no solo permitirá una producción de biodiesel más limpia, sino que se aleja de los métodos convencionales al incorporar una tecnología más sostenible.

Las tareas específicas para desarrollar este objetivo general serán las siguientes:

1. **Síntesis mecanoquímica de catalizadores basados en polímeros hiperreticulados,** preferiblemente fluorescentes
2. **Caracterización detallada de los catalizadores** utilizando técnicas de caracterización habituales como FT-IR, ^{13}C RMN en estado sólido, isotermas de adsorción-desorción de nitrógeno, SEM, y evaluación de sus propiedades ópticas cuando se incorporen grupos fluorescentes.
3. **Evaluación de la actividad catalítica** en la producción de biodiesel, con un enfoque particular en el estudio de la **reciclabilidad** del catalizador, para asegurar su viabilidad a largo plazo y su impacto en la sostenibilidad del proceso.

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

- **Estudiante de grado en Química** con buena base en **química orgánica** con interés en síntesis de polímeros y química de materiales**.**
- **Interés y curiosidad por la investigación**, especialmente en **química aplicada**, con interés en enfoques en **tecnologías sostenibles** como la catálisis/fotocatális y la mecanoquímica
- **Interés** sobre la implementación de la **sostenibilidad** en la investigación científica.

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

Este TFM ofrecerá al estudiante una **introducción integral a la investigación** científica, brindándole una oportunidad única para desarrollar competencias clave en la **síntesis mecanoquímica**, así como un buen conocimiento en la **química de polímeros** y su aplicación en el diseño de catalizadores. Al finalizar el proyecto, el estudiante será capaz de **evaluar y comparar la actividad catalítica** de diversos sistemas catalíticos, lo que le permitirá enfrentarse con confianza a futuros estudios o investigaciones en este campo.

Además, este TFM no solo proporcionará habilidades técnicas y científicas, sino también una comprensión profunda de la **importancia de la sostenibilidad** en la investigación y el desarrollo de tecnologías.

Este TMF le proporcionará una base sólida si desea continuar en el campo de la **química industrial**, la **energía renovable** o la **ciencia de los materiales**, permitiéndole contribuir a una **industria más limpia y eficiente**.

MASTERQO
MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGANICA
MENCIÓN DE MÁSTER EXCELENTE XUNTA DE GALICIA

UAM Universidad Autónoma de Madrid

UNIVERSIDAD COMPLUTENSE MADRID

USC UNIVERSIDADE DE SANTIAGO DE COMPOSTELA

XUNTA DE GALICIA

PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2025-2026

DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE

Apellidos y nombre del director(es) del proyecto: UDDIN MOHAMMAD AFSAR	
Cargo: Ramón y Cajal investigador	
Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto: Grupo de Supramolecular, Polymeric and Reticular Materials, Instituto de Ciencia de Materiales de Madrid (ICMM-CSIC), Campus de Cantoblanco, C. Sor Juana Inés de la Cruz, 3, 28049 Madrid	
Teléfono directo: 645491277	**e-mail: m.auddin@csic.es**

DATOS DEL PROYECTO

Título: Diseño, Síntesis y Estrategias de Dopaje para Semiconductores Orgánicos de Alto Rendimiento en Electrónica Flexible

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

El semiconductor orgánico es un tema de gran interés en la electrónica debido a sus múltiples ventajas, como su flexibilidad, ligereza y bajo costo de fabricación. Sin embargo, su baja conductividad y movilidad de portadores siguen siendo desafíos que requieren investigación adicional para su pleno desarrollo y aplicación en dispositivos electrónicos avanzados. (Reference: Conjugated Polymers: Synthesis & Design; American Chemical Society, 2023. DOI: 10.1021/acsinfocus.7e7026)

Este proyecto de tesis de maestría se centra en el diseño, la síntesis y el dopaje de semiconductores orgánicos para aplicaciones electrónicas avanzadas. La investigación tiene como objetivo desarrollar nuevos materiales orgánicos con propiedades electrónicas personalizadas mediante la exploración de arquitecturas moleculares innovadoras y estrategias de síntesis eficientes. Se abordará el dopaje para mejorar la movilidad de los portadores de carga, la estabilidad térmica y la conductividad eléctrica, aspectos fundamentales para su integración en dispositivos como transistores orgánicos, células solares, sensores y pantallas flexibles.

El enfoque del trabajo combina modelado teórico para predecir las propiedades de los nuevos compuestos, técnicas químicas de síntesis para su obtención y métodos de caracterización avanzada para evaluar su desempeño. Además, se analizará cómo diferentes configuraciones y niveles de dopaje afectan las propiedades eléctricas y mecánicas de los materiales, buscando optimizar su rendimiento para aplicaciones prácticas. Este estudio contribuirá al desarrollo de materiales semiconductores orgánicos de alto rendimiento, con propiedades ajustables que permitan la fabricación de dispositivos electrónicos más ligeros, flexibles y de menor costo, impulsando la innovación en la electrónica orgánica y potenciando la transición hacia tecnologías sostenibles y de amplio alcance.

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

El TFM debe tener conocimientos teóricos de reacción orgánica, cromatografía en columna, RMN, espectroscopia UV-visible, voltagrama cíclico, etc. Sin embargo, incluso donot tienen suficiente knowldege director explicará y enseñará todo para que sea más fácil para el estudiante. Los estudiantes pueden visitar el laboratorio en el ICMM y continuar el debate para conocer más detalles.

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

Los compuestos orgánicos conjugados Pi son muy interesantes para diversos campos de la electrónica y la catálisis. Los estudiantes estarán interesados en la síntesis orgánica basada en aplicaciones y en la aplicación real de los semiconductores orgánicos en la electrónica y las reacciones fotocatalíticas. No es necesario tener experiencia en todas estas áreas. El estudiante puede visitar nuestro laboratorio para ver en qué estamos trabajando. También pueden leer nuestros artículos publicados, los cuales pueden destacar algunos temas de interés. Los estudiantes pueden visitar las publicaciones del director https://orcid.org/0000-0002-3217-5513

MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGANICA
MENCIÓN DE MÁSTER EXCELENTE XUNTA DE GALICIA

PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2025-2026

DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE

Apellidos y nombre del director(es) del proyecto: UDDIN MOHAMMAD AFSAR	
Cargo: Ramón y Cajal investigador	
Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto: Grupo de Supramolecular, Polymeric and Reticular Materials, Instituto de Ciencia de Materiales de Madrid (ICMM-CSIC), Campus de Cantoblanco, C. Sor Juana Inés de la Cruz, 3, 28049 Madrid	
Teléfono directo: 645491277	**e-mail:** m.auddin@csic.es

DATOS DEL PROYECTO

Título: Optimización de Fotocatalizadores Orgánicos para la Producción Sostenible de Hidrógeno mediante División del Agua con Energía Solar

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

La producción de hidrógeno mediante la división del agua ofrece varias ventajas significativas como fuente de combustible renovable. Proporciona un portador de energía limpio y respetuoso con el medio ambiente, ya que su combustión produce únicamente agua, eliminando así las emisiones de gases de efecto invernadero relacionadas con los combustibles fósiles. Además, el hidrógeno tiene una alta densidad energética por peso, lo que lo convierte en un medio de almacenamiento eficiente para el exceso de energía solar generado durante las horas de mayor radiación. Su versatilidad también permite que se utilice en diversas aplicaciones, incluyendo celdas de combustible para generar electricidad limpia, procesos industriales y transporte. La capacidad de producir hidrógeno de manera sostenible mediante la fotocatalisis orgánica se alinea con los esfuerzos globales para reducir la huella de carbono y avanzar hacia una economía energética circular y sostenible. Esta tesis de maestría busca investigar el diseño y la optimización de fotocatalizadores semiconductores orgánicos para la conversión eficiente de la energía solar en combustibles renovables, como el hidrógeno, mediante la división del agua. Basándose en avances recientes en la fotocatalisis orgánica, el proyecto explorará nuevas arquitecturas moleculares y técnicas de modificación superficial para mejorar la eficiencia cuántica y la absorción de luz. Al estudiar de manera sistemática los efectos del ajuste del nivel de energía, las interfaces de heterojunciones y la nan Estructuración, esta investigación busca superar las limitaciones actuales en la eficiencia de conversión solar y desarrollar fotocatalizadores orgánicos escalables con mejor estabilidad y rendimiento. Los resultados de este trabajo contribuirán al avance de las tecnologías de energía sostenible y ofrecerán una comprensión más profunda de las relaciones estructura-propiedad en los sistemas fotocatalíticos orgánicos.

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

El TFM debe tener conocimientos teóricos de reacción orgánica, cromatografía en columna, RMN, espectroscopia UV-visible, voltagrama cíclico, etc. Sin embargo, incluso donot tienen suficiente knowldege director explicará y enseñará todo para que sea más fácil para el estudiante. Los estudiantes pueden visitar el laboratorio en el ICMM y continuar el debate para conocer más detalles.

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

Los compuestos orgánicos conjugados Pi son muy interesantes para diversos campos de la electrónica y la catálisis. Los estudiantes estarán interesados en la síntesis orgánica basada en aplicaciones y en la aplicación real de los semiconductores orgánicos en la electrónica y las reacciones foto catalíticas. No es necesario tener experiencia en todas estas áreas. El estudiante puede visitar nuestro laboratorio para ver en qué estamos trabajando. También pueden leer nuestros artículos publicados, los cuales pueden destacar algunos temas de interés. El artículo de revisión titulado "Avances en Fotocatalizadores Orgánicos para la Producción de Combustibles Solares" (Adv. Energy Mater. 2020, 10, 2001935) ofrece una visión completa sobre los avances recientes, los desafíos y las futuras direcciones en el campo de la fotocatálisis orgánica para la generación de combustibles solares. DOI: https://doi.org/10.1002/aenm.202001935. Los estudiantes pueden visitar las publicaciones del director https://orcid.org/0000-0002-3217-5513

MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGANICA
MENCIÓN DE MÁSTER EXCELENTE XUNTA DE GALICIA

PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2025-2026

DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE

Apellidos y nombre del director(es) del proyecto: Eva M. García Frutos/ Cristina Pascual González	
Cargo: Científico Titular/ Investigadoras Ramón y Cajal	
Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto: Fronteras en la química de materiales/ Materiales multifuncionales	
Teléfono directo **913349038**	**e-mail** **emgfrutos@icmm.csic.es/cristina.pascual@csic.es**

DATOS DEL PROYECTO

Título: Preparación y caracterización de nuevos materiales compuestos orgánicos mecanoluminiscentes.
Breve descripción de los objetivos, contenido del proyecto y tareas a realizar **Preparación de nuevos materiales compuestos orgánicos mecanoluminiscentes con diferentes aplicaciones dentro de la electrónica orgánica. Se realizarán síntesis, preparación y caracterización de nuevas moléculas orgánicas basadas en la plataforma de azaindol. Se profundizará en diferentes métodos de síntesis y purificación de estos. Se realizarán 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. Posteriormente, los compuestos orgánicos se incorporarán a biopolímeros mediante dos enfoques: por disolución (durante la fase de optimización de la composición) y por fusión (para la obtención de lotes mayores de entre 10 y 15 g). Los materiales obtenidos se granularán, y dichos gránulos se emplearán directamente como materia prima en impresión 3D. Cabe destacar que los composites se formularán a partir del biopolímero (PHB o PHBV) que presente una mayor respuesta piezoeléctrica. Para ello, se llevará a cabo un estudio comparativo de la relación procesamiento-propiedades de ambos polímeros, con el objetivo de identificar el sistema más adecuado para potenciar las funcionalidades del material compuesto y ampliar sus aplicaciones en dispositivos inteligentes, sensores y tecnologías sostenibles.**
Capacidades y conocimientos recomendables que debe tener el estudiante para la realización de este proyecto **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 **El máster 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/**

MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGANICA
MENCIÓN DE MÁSTER EXCELENTE XUNTA DE GALICIA

PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2025-2026

DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE

Apellidos y nombre del director del proyecto: Mavrantonakis, Andreas	
Cargo: Científico Titular	
Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto: Instituto de Ciencia de Materiales de Madrid (ICMM-CSIC), Calle Sor Juana Ines de la Cruz 3, Cantoblanco, 28049, Madrid	
Teléfono directo: 913348986	**e-mail:** andreas.mavrantonakis@icmm.csic.es

DATOS DEL PROYECTO

Título: Diseño computacional de materiales nanoporosos para la captura de contaminantes orgánicos persistentes en agua

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

Este proyecto de investigación tiene como objetivo el diseño computacional de materiales nanoporosos, en particular *Metal-Organic Frameworks* (MOFs), para la captura de contaminantes orgánicos persistentes en agua, como las sustancias per- y polifluoroalquiladas (PFAS).

Los objetivos científicos específicos incluyen:

- El diseño racional de MOFs mediante simulaciones computacionales para optimizar su capacidad de adsorción de contaminantes PFAS.
- El estudio de la interacción entre PFAS y MOFs utilizando métodos de química computacional como la Teoría del Funcional de la Densidad y la dinámica molecular.
- La identificación de sitios metálicos abiertos en MOFs que puedan mejorar las interacciones con las moléculas de PFAS.

Las tareas principales que se realizarán son:

- Cálculo de estructuras de equilibrio de moléculas PFAS, como el ácido trifluoroacético (TFA) y el ácido perfluorobutanosulfónico (PFBS), en interacción con MOFs basados en circonio.
- Estudio de la interacción de PFAS con MOFs que contienen centros metálicos abiertos.
- Simulación de la interacción del agua con los MOFs para evaluar la selectividad de adsorción.
- Cálculo de energías de interacción y entalpías de adsorción de PFAS, comparándolas con las del agua.
- Análisis detallado de los enlaces y mecanismos de adsorción.

Ejemplos de trabajos relacionados:

- Adv. Funct. Mater. 2024, 34, 2409932
- Nat. Commun. 2023, 14, 2506
- Nat. Commun. 2017, 8, 14496

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

Se recomienda que el/la estudiante tenga un buen nivel de comprensión lectora y expresión en inglés, ya que parte de la bibliografía y las herramientas utilizadas están en este idioma.

Asimismo, es aconsejable que esté cursando (o haya cursado) la asignatura de Química Computacional, y que posea conocimientos básicos sobre el funcionamiento de sistemas operativos basados en Linux, dado que muchas de las herramientas de simulación se ejecutan en este entorno.

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

Desde el punto de vista formativo, este proyecto ofrece al estudiante la oportunidad de adquirir una visión amplia y actualizada sobre el diseño de nuevos materiales porosos con aplicaciones medioambientales, especialmente en la remediación de contaminantes persistentes en agua. A través del uso de herramientas avanzadas de química computacional, el estudiante desarrollará competencias clave en modelado molecular, análisis estructural y evaluación de propiedades de adsorción, habilidades altamente valoradas tanto en el ámbito académico como en el industrial.

MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGANICA
MENCIÓN DE MÁSTER EXCELENTE XUNTA DE GALICIA

PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2025-2026

DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE

Apellidos y nombre del director(es) del proyecto: Gómez-Lor Pérez Berta	
Cargo: Investigadora Científica CSIC	
Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto: Fronteras en Química de Materiales	
Teléfono directo **916633461**	**e-mail** **bgl@icmm.csic.es**

DATOS DEL PROYECTO

Título: Materiales inteligentes orgánicos y sus aplicaciones en tintas de seguridad
Breve descripción de los objetivos, contenido del proyecto y tareas a realizar Los materiales inteligentes son aquellos cuyas propiedades pueden modularse dinámicamente mediante estímulos externos, de forma controlada, para realizar tareas específicas de manera útil, fiable y reproducible, con el objetivo de obtener funcionalidades avanzadas. Este TFM se centrará en el estudio de materiales semiconductores orgánicos cuya respuesta a estímulos físicos (como temperatura o presión) modula sus propiedades (opto)electrónicas. Basándonos en resultados previos del grupo (Adv. Optical Mater. 2025, 13, 2400965), se sintetizarán nuevos fluoróforos orgánicos. Se explorará cómo la organización supramolecular influye en su comportamiento dinámico y funcional. El objetivo final es desarrollar un material orgánico sensible a distintos estímulos para su aplicación en tintas de seguridad..
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..).

MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGANICA
MENCIÓN DE MÁSTER EXCELENTE XUNTA DE GALICIA

Máster universitario en Química Orgánica (M60)

Relación de Trabajos de Investigación ofertados en INSTITUTO DE QUÍMICA MÉDICA (IQM, CSIC)

CSIC Consejo Superior de Investigaciones Científicas — Instituto de Química Médica

CURSO ACADÉMICO 2025-2026

Director(es)	Título del proyecto
QUESADA DEL SOL, Ernesto	*N-tioimidas y análogos: una familia inexplorada de compuestos con potencial terapéutico. Inhibidores de entrada de SARS-CoV-2, agentes frente a mPox (viruela) y otras actividades biológicas.*
NÚÑEZ VILLANUEVA, Diego	*Grapado de péptidos dirigido por plantillas: una estrategia para desarrollar péptidos helicoidales de interés biológico*
LEÓN MARTÍNEZ, Rafael	*Fármacos multidiana para el tratamiento de enfermedades neurodegenerativas (Alzheimer, Parkinson, Esclerosis múltiple). Síntesis orgánica y cribado farmacológico*
DARDONVILLE, Christophe	*Síntesis de nuevos inhibidores alostéricos de la oxidasa alternativa de tripanosoma (TAO)*

MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGANICA
MENCIÓN DE MÁSTER EXCELENTE XUNTA DE GALICIA

PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2025-2026

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 (tenured scientist)	
Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto: Instituto de Química Médica (IQM) 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 91 562 29 00 (ext. 282 vs 203 vía centralita)	**e-mail** EQ1@iqm.csic.es

DATOS DEL PROYECTO

Título:

N-tioimidas y análogos: una familia inexplorada de compuestos con potencial terapéutico. Inhibidores de entrada de SARS-CoV-2, agentes frente a mPox (viruela) y otras actividades biológicas.

Descripción de los objetivos, contenido del proyecto y tareas a realizar

Este proyecto se propone para la realización de un Trabajo de Fin de Máster (TFM) a desarrollar dentro de una de las líneas de trabajo en desarrollo en el momento actual en el grupo de investigación del IQM "*Nucleósidos y análogos como fuente de moléculas bioactivas*". Este grupo avala una contrastada experiencia formativa, tanto de personal investigador como de personal técnico.

N-tioimidas y análogos: una familia inexplorada de compuestos con potencial terapéutico. Inhibidores de entrada de SARS-CoV-2, agentes frente a mPox (viruela) y otras actividades biológicas

Aunque la Organización Mundial de la Salud (OMS) declaró el fin de la emergencia sanitaria por COVID-19 en mayo de 2023, la enfermedad continúa representando una amenaza para la salud pública global. La erradicación completa del agente causante, *Severe Acute Respiratory Syndrome Coronavirus 2* (SARS-CoV-2), sigue siendo un objetivo difícil de alcanzar a corto y medio plazo.

Afortunadamente, la pandemia pudo ser controlada gracias al desarrollo de vacunas capaces de inducir anticuerpos neutralizantes que bloquean eficazmente la infección. Estas vacunas fueron posibles gracias a innovadores avances tecnológicos en el uso de mRNA que codificaban

fragmentos inocuos de la proteína S (S-Prot) viral. Se ha demostrado que SARS-CoV-2 inicia su proceso infectivo mediante la interacción de la glicoproteína S-Prot con los receptores de la enzima convertidora de angiotensina 2 (ACE2), localizada en la superficie de las células del huésped humano.

A pesar del éxito alcanzado gracias a las vacunas en el control de la COVID-19, persiste la preocupación sobre la evolución de la enfermedad, especialmente debido a la aparición de nuevas variantes mutadas de la proteína S-Prot. Así, desde la detección de la cepa original en Wuhan (China), han surgido múltiples variantes, como Ómicron, que ha dado lugar a diferentes linajes que muestran la capacidad de evadir la inmunidad generada por infecciones previas o gracias a la vacunación. Esta situación refuerza el interés existente todavía en identificar y desarrollar nuevos agentes quimioterapéuticos capaces de bloquear la entrada del virus. Para que estos agentes antivirales sean eficaces, es fundamental que tengan un amplio espectro de acción y sea adapten a las distintas variantes emergentes de la S-Prot viral.

En este contexto, los ensayos de cribado de alto rendimiento (HTS) basados en virus de la estomatitis vesicular pseudotipados con la S-Prot (VSV-S) representan una herramienta sencilla y fiable para la identificación rápida de nuevos compuestos con potencial como inhibidores de la entrada viral y adaptados a la variedad prevalente en cada momento.

En nuestro grupo de investigación se han identificado una serie de compuestos con capacidad para inhibir la adhesión de SARS-CoV-2 a las células huésped utilizando VSV-S de SARS-CoV-2, mostrado valores de IC_{50} submicromolares, lo que representa un resultado prometedor.

A partir de este hallazgo, se ha diseñado un programa de química médica orientado a la síntesis de una colección (quimioteca) de derivados con el objetivo de identificar moléculas con mayor actividad antiviral y propiedades farmacocinéticas mejoradas.

En este marco, se propone como Trabajo de Fin de Máster (TFM) la síntesis de una serie de *N*-tioimidas arílicas evolucionadas a partir de los compuestos prototipo e introducir nuevas funcionalidades para determinar su capacidad para inhibir la entrada viral sin comprometer el perfil de seguridad celular.

En paralelo, resultados preliminares indican que existe potencial como agentes antivirales frente a mPox (viruela del mono), por lo que se desarrollará igualme3nte unja campaña de cribado biológico frente a este patógeno.

El proyecto cuenta con antecedentes previos sólidos, pero mantiene un alto grado de novedad y originalidad.

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).

N-thioimides and analogues: an unexplored family of compounds with therapeutic potential. SARS-CoV-2 entry inhibitors, agents against mPox (monkeypox), and other biological activities

Although the WHO declared the end of the COVID-19 emergency in May 2023, the disease remains as a global public health threat and complete eradication of the causative agent, the severe acute respiratory syndrome coronavirus 2 (SARS-CoV-2), remains an elusive goal in the short-to-medium term. Fortunately, this lethal pandemic has been controlled by the emergence of vaccines capable of inducing neutralizing antibodies that efficiently block infection. These vaccines were developed using revolutionary mRNA technical breakthroughs based on harmless fragments of the spike-shaped S protein (S-Protein). It is well stablished that SARS-CoV-2 infects cells through the interaction of S-protein located on the surface of the virus with the angiotensin-converting enzyme (ACE2) cell receptors.

In spite of these success, the main concerns regarding the contemporary clinical landscape of the disease are the emergence of new variants, particularly focused on mutations on the S-protein. Since the identification of the original Wuhan strain, there have been multiple variants of concern, like the Omicron variants, which evolved into five lineages, among them the XBB1.5, the currently most prevalent subvariant due to its enhanced immune evasion from protection provided by prior infections or vaccines. This stresses the interest of identifying and developing new chemotherapeutics, including small molecules, to combat COVID infection targeting the entry of the virus into the host cells as a still attractive strategy whether the antivirals under investigation are adapted to the dominant S-protein variants.

In this context, high-throughput screening (HTS) assays based on pseudotyped vesicular stomatitis viruses expressing the currently prevailing S-protein of SARS-CoV-2 (VSV-S) can be considered as simple, reliable methods for the rapid identification of novel compounds with potential as entry inhibitors.

A prototype compound previously identified in our research group proved a noticeable ability to inhibit the virus attachment to the host cells in the pseudotyped model system, showing IC_{50} values in the low μM range. These promising results prompted us to initiate a medicinal chemistry program directed to provide a larger library of structurally-related derivatives from which to select for a molecule with enhanced activity and improved properties.

We propose herein a TFM project focused on the synthesis of a library of simplified synthetic thioaryl imides evolved from the prototype. The obtained derivatives will be evaluated on VSV-S pseudoparticles harboring the XBB.1.5 S protein in Vero E6 cells expressing the TMPRSS2 entry factor to assess their ability to inhibit the virus attachment to the host cells in the model system whereas keeping a safety profile.

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

El proyecto se encuadra dentro del área de la Química Médica (química terapéutica) y está relacionado también con disciplinas afines (química orgánica; química biológica). El trabajo, por tanto, estaría destinado preferentemente a estudiantes con formación de grado en química o farmacia, siendo MUY IMPORTANTE el conocimiento y experiencia previa en el área de la química orgánica sintética.

The work would be particularly directed to students with a degree in chemistry or pharmacy, with previous knowledge and experience in the area of synthetic organic chemistry (VERY IMPORTANT).

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

Se ruega a aquellos estudiantes interesados en este proyecto de TFM que contacten con el investigador responsable lo antes posible (EQ1@iqm.csic.es) para garantizar la disponibilidad de espacio antes de comprometer con la universidad la asignación del TFM.

Los estudiantes se integrarán 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/

Please, students interested in this TFM project are kindly requested to contact the researcher (EQ1@iqm.csic.es) as soon as possible to guarantee the availability of space before committing the TFM assignment to the university.

Students will join the research group "Nucleosides and analogues as a source of bioactive molecules" at Institute of Medicinal Chemistry CSIC (IQM), where this project will be included in one of the research lines currently 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:11 de julio de 2025

Firma del director del proyecto

MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGANICA
MENCIÓN DE MÁSTER EXCELENTE XUNTA DE GALICIA

PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2025-2026

DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE

Apellidos y nombre del director(es) del proyecto: Núñez Villanueva, Diego	
Cargo: Científico titular en el IQM-CSIC	
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 915622900 (ext 443367)	**e-mail:** diegonunez@iqm.csic.es

DATOS DEL PROYECTO

Título: Grapado de péptidos dirigido por plantillas: una estrategia para desarrollar péptidos helicoidales de interés biológico
Breve descripción de los objetivos, contenido del proyecto y tareas a realizar La desregulación de las interacciones proteína-proteína (PPIs) está implicada en numerosas enfermedades, lo que las convierte en dianas terapéuticas prometedoras. Entre ellas, la interacción p53-MDM2 desempeña un papel clave en la regulación de la supresión tumoral. En el cáncer, la función de p53 suele estar comprometida por deleciones, mutaciones o por la sobreexpresión de MDM2. En tumores con p53 de tipo salvaje, la disrupción de esta interacción permite restaurar su función proapoptótica. Además de inhibir a p53, MDM2 presenta efectos oncogénicos independientes, por lo que su inhibición representa una estrategia atractiva en terapias antitumorales. El objetivo de este proyecto es desarrollar herramientas terapéuticas basadas en péptidos para modular dicha interacción, con vistas al diseño de nuevas terapias contra el cáncer. En particular, se centrará en el desarrollo de metodologías sintéticas innovadoras para estabilizar péptidos helicoidales, que sirvan como base para diseñar inhibidores duales frente a MDM2. Se trata de un proyecto multidisciplinar que integra química orgánica, química supramolecular y química médica, junto con técnicas biofísicas y estructurales. El estudiante se familiarizará con métodos de síntesis orgánica en disolución y en fase sólida, así como con técnicas de análisis estructural como la modelización molecular y la espectroscopía de RMN. Trabajará en un laboratorio completamente equipado para síntesis orgánica en disolución, síntesis automática de péptidos en fase sólida y análisis por HPLC, además de contar con acceso a servicios de RMN, HPLC-MS e interacciones biofísicas disponibles en el centro.
Capacidades y conocimientos recomendables que debe tener el estudiante para la realización de este proyecto Se recomienda que el estudiante cuente con conocimientos previos en técnicas generales de síntesis orgánica, HPLC y análisis estructural, especialmente espectroscopía de RMN. No obstante, lo más importante es tener una actitud proactiva, interés por la investigación y motivación para aprender. Este proyecto ofrece una oportunidad única para adquirir competencias técnicas y científicas altamente valoradas en el ámbito académico e industrial.
Indíquese cualquier otra aclaración que se considere que pueda ayudar a los estudiantes en la elección del TFM El proyecto contará con una supervisión cercana y personalizada, orientada a fomentar el desarrollo de habilidades prácticas en síntesis orgánica, así como competencias transversales como la autonomía, la organización, la redacción científica y la comunicación oral. Esta investigación forma parte de un proyecto más amplio con proyección a publicaciones científicas, en las que se reconocerá la contribución de los estudiantes mediante su inclusión como coautores. Se trata, por tanto, de una excelente oportunidad para integrarse en un entorno de investigación activo y multidisciplinar.

MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGANICA
MENCIÓN DE MÁSTER EXCELENTE XUNTA DE GALICIA

PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2025-2026

DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE

Apellidos y nombre del director(es) del proyecto: Rafael León	
Cargo: Investigador Científico	
Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto: Grupo de Neurofármacos, Instituto de Química Médica, CSIC (IQM-CSIC	
Teléfono directo: 91 258 74 21	**e-mail: rafael.leon@iqm.csic.es**

DATOS DEL PROYECTO

Título: Fármacos multidiana para el tratamiento de enfermedades neurodegenerativas (Alzheimer, Parkinson, Esclerosis múltiple). Síntesis orgánica y cribado farmacológico
Breve descripción de los objetivos, contenido del proyecto y tareas a realizar El proyecto se centra en el desarrollo de nuevos fármacos para el tratamiento de enfermedades neurodegenerativas. Actualmente, tenemos proyectos activos en la enfermedad de Alzheimer, Parkinson y esclerosis múltiple por lo que el trabajo puede realizarse en cualquiera de ellos. Se realizará la síntesis de moléculas diseñadas para ejercer dos o más actividades biológicas y, en el mismo laboratorio, se realizará la evaluación biológica de las actividades integradas en los fármacos sintetizados. También podrá realizarse un estudio avanzado del mecanismo de acción mediante técnicas de biología molecular en el propio laboratorio.
Capacidades y conocimientos recomendables que debe tener el estudiante para la realización de este proyecto: Imprescindible licenciatura en química en la especialidad de química orgánica. Recomendable, conocimientos de experimentación farmacológica y métodos de docking y dinámica molecular. Recomendable, conocimiento en técnicas de biología molecular.
Indíquese cualquier otra aclaración que se considere que pueda ayudar a los estudiantes en la elección del TFM

MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGANICA
MENCIÓN DE MÁSTER EXCELENTE XUNTA DE GALICIA

PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2025-2026

DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE

Apellidos y nombre del director(es) del proyecto: Christophe Dardonville	
Cargo: Investigador Científico	
Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto: Instituto de Química Médica / Consejo Superior de Investigaciones Científicas (IQM-CSIC) C/ Juan de la Cierva, 3 28006 MADRID	
Teléfono directo 912587490 https://www.iqm.csic.es/antiparasitic-drugs/	**e-mail** dardonville@iqm.csic.es

DATOS DEL PROYECTO

Título: Síntesis de nuevos inhibidores alostéricos de la oxidasa alternativa de tripanosoma (TAO)
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 - Muy buenos conocimientos en síntesis orgánica y experiencia demostrada en laboratorio de química orgánica. - Buen nivel de comprensión lectora en inglés.
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*.

Máster universitario en Química Orgánica (M60)

Relación de Trabajos de Investigación ofertados en INSTITUTO DE QUÍMICA ORGÁNICA GENERAL (IQOG, CSIC)

CURSO ACADÉMICO 2025-2026

Director(es)	Título del proyecto
VISO BERONDA, ALMA	*Síntesis y reactividad de ciclos tensionados que contienen ésteres borónicos Csp3*
HERRADÓN GARCÍA, BERNARDO	*Síntesis, estructura y propiedades de híbridos péptido-molde*
URIEL ARIAS, CLARA	*Síntesis y estudios estructurales, fotofísicos y biológicos de los colorantes BODIPY 1,2,3-iso-triazoles y BOPHY 1,2,3-triazoles, incluyendo glicoderivados*
MANN MORALES, ENRIQUE; CHIARA ROMERO, Jose Luis	*Moléculas fluorescentes para aplicaciones biomédicas avanzadas*
DOMÍNGUEZ ÁLVAREZ, ENRIQUE	*Síntesis y caracterización de selenoésteres con actividad antitumoral, antiparasitaria y antibacteriana*
JIMÉNEZ MORENO, ESTER	*Diseño de conectores escindibles sensibles al microambiente tumoral para la liberación selectiva de fármacos*
COLOMER UTRERA, IGNACIO	*A straightforward Pd-catalyzed access to bioactive Benzocyclobutenes*
COLOMER UTRERA, IGNACIO	*Lipopeptides as tools in supramolecular chemistry and catalysis*
GARCÍA ÁLVAREZ, ISABEL	*Síntesis de antagonistas de receptores de glutamato para estudiar la señalización glutamatérgica en cerebro*
MARCO CONTELLES, JOSÉ LUIS; TOLEDANO PINEDO, MIREIA	*Nuevas moléculas para la terapia de la enfermedad de Alzheimer*

MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGANICA
MENCIÓN DE MÁSTER EXCELENTE XUNTA DE GALICIA

FERNÁNDEZ DE LA PRADILLA, ROBERTO	*Reactividad de ésteres borónicos con derivados de azufre enantiopuros (sulfóxidos, sulfoximinas, etc.)*

MASTERQO
MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGANICA
MENCIÓN DE MÁSTER EXCELENTE XUNTA DE GALICIA

UAM Universidad Autónoma de Madrid
UNIVERSIDAD COMPLUTENSE MADRID
USC UNIVERSIDADE DE SANTIAGO DE COMPOSTELA
XUNTA DE GALICIA

PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2025-2026

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	**e-mail**
912587515	almaviso@iqog.csic.es

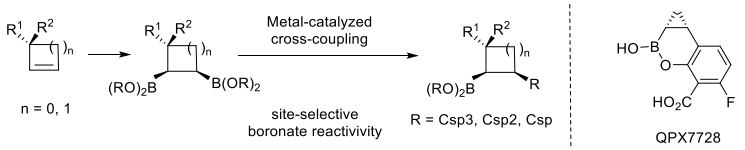
DATOS DEL PROYECTO

Título: Síntesis y reactividad de ciclos tensionados que contienen ésteres borónicos Csp^3

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 estereocontrolada y, dentro de los métodos de síntesis asimétrica accesibles, 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 desimetrización de ciclobutil y ciclopropil boronatos catalizada por metales, 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 la preparación y reactividad de de ciclopropil y ciclobutil bis(boronatos), buscando la funcionalización regioselectiva de bis-boronatos[2] mediante acoplamientos mediados por cobre, oxidaciones, elongación de Matteson, etc. y su posible aplicación a la síntesis de productos de interés, entre otros los análogos del ácido borónico cíclico QPX7728, un potente inhibidor de betalactamasas de espectro ultra amplio y de carbapenasas, descubierto por QPEX biopharma que se encuentra en fase clínica 1.[3]



[1] a) M. Guisán-Ceinos, A. Parra, V. Martín-Heras, M. Tortosa. Enantioselective Synthesis of Cyclobutylboronates via a Copper-Catalyzed Desymmetrization Approach. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2016**, *55*, 6969 –6972. b) A. Parra, L. Amenós, M. Guisán-Ceinos, A. López, J. L. Garcia Ruano, M. Tortosa, *J. Am. Chem. Soc.* **2014**, *136*, 15833. c) J. Teresa, M. Velado, R. Fernández de la Pradilla, A. Viso, B. Lozano, M. Tortosa. Enantioselective Suzuki Cross-Coupling of 1,2-Diboryl Cyclopropanes. *Chemical Science*, **2023**, *14*, 1575-1581.

[2.] A. Viso, R. Fernández de la Pradilla, and M. Tortosa. Site-Selective Functionalization of C(sp3) Vicinal Boronic Esters. *ACS Catal*. **2022**, *12*, 10603−10620

[3]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.

MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGANICA
MENCIÓN DE MÁSTER EXCELENTE XUNTA DE GALICIA

PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2025-2026

DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE

Apellidos y nombre del director(es) del proyecto: Herradón García, Bernardo	
Cargo: Investigador Científico	
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 699607232	**e-mail** b.herradon@iqog.csic

DATOS DEL PROYECTO

Título: Síntesis, estructura y propiedades de híbridos péptido-molde

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

Línea de investigación: Síntesis, estructura y propiedades de híbridos péptido-molde

Los híbridos péptidos-molde son compuestos en los que una cadena de aminoácido o peptídico se unen a un fragmento no-peptídico (el molde).
La estructura y propiedades electrónicas y electrostáticas del molde son capaces de influir en la conformación de la cadena peptídica; que, a su vez, está relacionada con sus propiedades (biológicas y tecnológicas).
Como moldes, nuestro grupo ha utilizado previamente biarilos, heterociclos aromáticos parcialmente reducidos, carbohidratos y carbociclos; obteniendo compuestos con actividades biológicas como inhibidores de proteasas (calpaína y caspasas), antivirales, antimaláricos y neroprotectores.

Trabajo a realizar

El TFM propuesto va a continuar nuestros estudios sobre la síntesis, estructura y determinación de actividad biológica de derivados de aminoácidos y péptidos con una variedad de sustituyentes en la cadena natural de los aminoácidos, usando como moldes derivados de sistemas aromáticos novedosos (ácido bifenil-2-carboxílico y análogos nitrogenados, ácido antracenil-9-carboxílico, ácido fluoren-9-on-1-carboxílico, ácido fluoren-9-on-4-carboxílico y ácido piridin-2,3-dicarboxílico).
Por razones prácticas es necesario que las síntesis sean lo más cortas y eficaces posibles (alto rendimiento y selectividad, procedimientos sencillos) por lo que los moldes son sustancias químicas comerciales o fácilmente sintetizables en secuencias sintéticas cortas.
Para la síntesis de los péptidos e híbridos péptido-molde se utilizarán una variedad de procedimientos en química de aminoácidos y péptidos, que permitirán adquirir experiencia en síntesis orgánica.
Estructuralmente se estudiará la conformación de las sustancias, sus propiedades dinámicas (por medio de la RMN a temperatura variable), interacción con cationes y, en el caso de cristales, las interacciones no covalente responsables del empaquetamiento cristalino.

Los compuestos sintetizados se evaluarán biológicamente como inhibidores de proteasas. Los resultados biológicos se correlacionarán con las estructuras.

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

Probablemente, las principales características que se requieren de la/el estudiante es las ganas de aprender y que no le importe trabajar en un proyecto multidisciplinar.

La experiencia en la mayoría de las técnicas experimentales (y sus fundamentos) serán adquiridos por la/el estudiante durante el desarrollo de este TFM.

Se valorarán el conocimiento en técnicas generales de laboratorio en química (especialmente en síntesis de compuestos orgánicos), así como ciertos conocimientos en la interpretación de los datos espectroscópicos.

También sería importante que la/el estudiante tenga una cierta familiaridad con búsquedas bibliográficas e información en Internet.

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

La o el estudiante deben tener interés en el trabajo multidisciplinar; que abarca, desde la síntesis orgánica al estudio de propiedades biológicas, con un especial énfasis en aspectos estructurales y en relaciones estructura-propiedades.

MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGANICA
MENCIÓN DE MÁSTER EXCELENTE XUNTA DE GALICIA

PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2025-2026

DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE

Apellidos y nombre del director(es) del proyecto: Uriel Arias, Clara	
Cargo: Científico Titular	
Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto: Departamento de Química Bioorgánica Instituto de Química Orgánica General Calle Juan de la Cierva nº3 28006 Madrid	
Teléfono directo 915622900-912587639	**e-mail** clara.uriel@csic.es

DATOS DEL PROYECTO

Título: Síntesis y estudios estructurales, fotofísicos y biológicos de los colorantes BODIPY 1,2,3-iso-triazoles y BOPHY 1,2,3-triazoles, incluyendo glicoderivados.
Breve descripción de los objetivos, contenido del proyecto y tareas a realizar El propósito de esta investigación es estudiar la síntesis, así como las propiedades estructurales, fotofísicas y biológicas de compuestos BODIPY y derivados de BOPHY que incorporan unidades 1,2,3-triazol, incluyendo glicoderivados y derivados con otas biomoléculas. A partir de observaciones previas que revelaron un comportamiento de agregación tipo J en BODIPY C-2,C-6 bis-1,2,3-triazol, nos proponemos: i) profundizar en la comprensión de dicho fenómeno; y ii) explorar el potencial de agregación en J en colorantes BOPHY con estructuras afines. Para alcanzar estos objetivos, se plantea la síntesis química de isómeros C-2,C-6 bis-1,2,3-iso-triazol de BODIPY, así como la obtención de BOPHY con sustituyentes 1,2,3-bis-triazolil. Los primeros, al presentar diferentes orientaciones de los grupos triazol respecto a los compuestos ya estudiados, permitirán analizar el efecto de dicha orientación sobre la agregación en J. Por su parte, los derivados de BOPHY nos permitirán determinar si las interacciones supramoleculares mediadas por triazoles observadas en BODIPY también se manifiestan en esta familia de colorantes. Además, los nuevos derivados de BODIPY/BOPHY contarán con diversas funcionalidades (azido, alquino, hidroxilo…) que permitan su conjugación a biomoléculas. El estudiante realizará la síntesis química, purificación y caracterización de nuevos derivados de BODIPY/BOPHY. Aprenderá y/o consolidará el manejo de material y aparatos de un laboratorio de síntesis orgánica y técnicas como la resonancia magnética nuclear y la espectrometría de masas. Además, el estudiante podrá desarrollar competencias específicas en el uso de software y tecnologías digitales aplicadas a la química: software de visualización molecular (ChemDraw), software de análisis de datos (MestReNova), bases de datos químicas (ChemSpider, PubChem, Reaxys, WebOfScience).
Capacidades y conocimientos recomendables que debe tener el estudiante para la realización de este proyecto El estudiante deberá tener conocimientos en síntesis orgánica y análisis estructural. En general deberá tener capacidad de trabajar en equipo 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 se integrará en un grupo que se relaciona con otros grupos de físicos y biólogos, pudiendo tener una visión global del proceso de síntesis, caracterización y estudio de propiedades fotofísicas y biológicas de los compuestos sintetizados.

MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGANICA
MENCIÓN DE MÁSTER EXCELENTE XUNTA DE GALICIA

PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2025-2026

DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE

Apellidos y nombre del director(es) del proyecto: **Enrique Mann Morales/Jose Luis Chiara Romero**	
Cargo: Investigador en plantilla/Investigador Científico	
Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto: Dpto. Química Bio-Orgánica, Instituto Química Orgánica General, CSIC, Juan de la Cierva Nº 3, 28006, Madrid	
Teléfono directo 912587476 (centralita: 915622900)	**e-mail** **mann@iqog.csic.es**

DATOS DEL PROYECTO

Título:

Moléculas fluorescentes para aplicaciones biomédicas avanzadas

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

El proyecto tiene por objetivo el diseño y síntesis de nuevos colorantes fluorescentes de interés con aplicaciones avanzadas en biomedicina (bioimagen celular y/o terapia fotodinámica). El estudiante estará directamente involucrado en la preparación y caracterización de una serie de moléculas orgánicas necesarias para el desarrollo de los proyectos de investigación que se están desarrollando actualmente en el grupo de investigación. El estudio de las propiedades fotofísicas y los ensayos biológicos preliminares se realizarán en colaboración con otros grupos de investigación que participan en estos proyectos. El estudiante adquirirá experiencia directa en el funcionamiento diario de un laboratorio de investigación en química orgánica, bio-orgánica y nanomateriales.

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

Química orgánica básica, 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. Adicionalmente, se adquirirá experiencia en el área de la preparación de algunos tipos de nanomateriales (nanopartículas, nanocelulosa, etc) así como en sus técnicas de caracterización.

MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGANICA
MENCIÓN DE MÁSTER EXCELENTE XUNTA DE GALICIA

PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2025-2026

DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE

Apellidos y nombre del director(es) del proyecto: DOMÍNGUEZ ÁLVAREZ, ENRIQUE	
Cargo: CIENTÍFICO TITULAR	
Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto: DEPARTAMENTO DE SÍNTESIS, ESTRUCTURA Y PROPIEDADES DE COMPUESTOS ORGÁNICOS (SEPCO); INSTITUTO DE QUÍMICA ORGÁNICA GENERAL, CONSEJO SUPERIOR DE INVESTIGACIONES CIENTÍFICAS (IQOG-CSIC) C/ JUAN DE LA CIERVA 3	
Teléfono directo *Contactar por correo electrónico*	**e-mail** e.dominguez-alvarez@iqog.csic.es

DATOS DEL PROYECTO

Título:

SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DE SELENOÉSTERES CON ACTIVIDAD ANTITUMORAL, ANTIPARASITARIA Y ANTIBACTERIANA
Synthesis and characterization of selenoesters with antitumoral, antiparasitary and antibacterial activity

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

El objetivo de este TFM es la síntesis, purificación y caracterización de nuevos selenoderivados orgánicos, que contienen selenio en su fórmula molecular, principalmente en la forma de los selenoésteres. Dichos compuestos se han de obtener en una cantidad y pureza suficientes para que pueda evaluarse, durante o tras el TFM, su actividad antitumoral, antiparasitaria y antibacteriana. La pureza ha de ser superior al 95% para que los derivados puedan evaluarse en estudios farmacológicos, lo que implica que se realizarán purificaciones de los derivados hasta que cumplan con este umbral de pureza.

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 con posibles aplicaciones como antitumorales, como antibacterianos, como antifúngicos o como antiparasitarios.

En este contexto, el director del proyecto lleva años trabajando en la síntesis, purificación y caracterización de selenocompuestos con actividades biológicas. 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. Y finalmente se evaluará la actividad de los derivados frente a parásitos que generan enfermedades en el Tercer Mundo, tales como la leishmaniasis (*Leishmania donovani*, *L. infantum*) y la enfermedad de Chagas (*Trypanosoma cruzi*).

Existe la posibilidad de que la actividad antitumoral pueda evaluarse en el centro; en ese caso se podría explicar al estudiante cómo se realizan los ensayos de citotoxicidad que permiten determinar dicha actividad. Además, permitiría, de poderse hacer al final, llevar a cabo un cribado inicial de la actividad antitumoral que reorientaría las síntesis realizadas al final del trabajo hacia la obtención de derivados de los que hayan tenido una mayor actividad. Finalmente, de poder realizarse en centros colaboradores, se plantea la posibilidad de evaluar la capacidad de los derivados para inhibir proteínas involucradas en la resistencia a fármacos, como las bombas de eflujo.

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 ORGANICA
MENCIÓN DE MÁSTER EXCELENTE XUNTA DE GALICIA

PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2025-2026

DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE

Apellidos y nombre del director(es) del proyecto: Ester Jiménez Moreno	
Cargo: Científica Titular	
Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto: Instituto de Química Orgánica General (CSIC) C/ Juan de la Cierva 3, 28006, Madrid	
Teléfono directo 915622900	**e-mail** ester.jimenez@csic.es

DATOS DEL PROYECTO

Título: Diseño de conectores escindibles sensibles al microambiente tumoral para la liberación selectiva de fármacos

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

La administración dirigida de fármacos a células tumorales es una vía muy prometedora para el tratamiento del cáncer ya que minimiza la acción del fármaco en tejidos sanos, reduciendo los efectos secundarios del tratamiento y permite una mayor concentración del fármaco en el tumor aumentando la eficacia. La administración dirigida de fármacos se consigue gracias a sistemas que se componen de tres elementos: un ligando responsable de transportar el fármaco al tumor de forma selectiva como anticuerpos, péptidos o carbohidratos, un conector que une el ligando trasportador con el fármaco y que facilita la liberación controlada del fármaco en el tumor y el fármaco en sí. En el diseño de estos sistemas la elección del conector es crucial ya que deben mantenerse estable en circulación y ser capaz de liberar el fármaco solamente una vez que el conjugado ha alcanzado el tumor.

Por ello, este proyecto se enfocará en el desarrollo de nuevos conectores escindibles que sean capaces de liberar de una forma precisa y controlada fármacos tras la acción de enzimas que se encuentran sobreexpresadas en el tumor, evitando con ello una liberación prematura del fármaco.

El/la estudiante tendrá la oportunidad de participar en un proyecto multidisciplinar que le permitirá adquirir experiencia en diferentes técnicas y estrategias de gran utilidad ampliamente utilizadas en laboratorios químicos. En concreto obtendrá experiencia en síntesis orgánica, técnicas de purificación como cromatografía flash en columna, extracción líquido-líquido o recristalización, caracterización estructural mediante el uso técnicas como resonancia magnética nuclear y espectrometría de masas, evaluación de la estabilidad de los conectores y conjugados sintetizados y de la liberación de los fármacos mediante el seguimiento de reacciones enzimáticas y empleo de bases de datos científicas como Reaxys, Scifinder o Scopus y de software científico como Chemdraw o MestreNova.

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

Conocimiento de química orgánica, alta motivación y capacidad de trabajo

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

MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGANICA
MENCIÓN DE MÁSTER EXCELENTE XUNTA DE GALICIA

PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2025-2026

DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE

Apellidos y nombre del director(es) del proyecto: Ignacio Colomer Utrera	
Cargo: Científico Titular (CSIC)	
Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto: IQOG-CSIC	
Teléfono directo: 91 258 7590	**e-mail:** colomer@iqog.csic.es

DATOS DEL PROYECTO

Título: A straightforward Pd-catalyzed access to bioactive Benzocyclobutenes

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

Background

Scillascillin is a benzocyclobutane containing natural product with important activity towards breast and prostate cancer (Figure 1, left);[1] however there is no general and robust method to access structural variability of this type of molecules.[2] We have recently reported the Hydroarylation of alkenes and conjugated dienes using HFIP,[3] where HFIP both activates de alkene and directs the reactivity of the aryl moiety (Figure 1, right).[4]

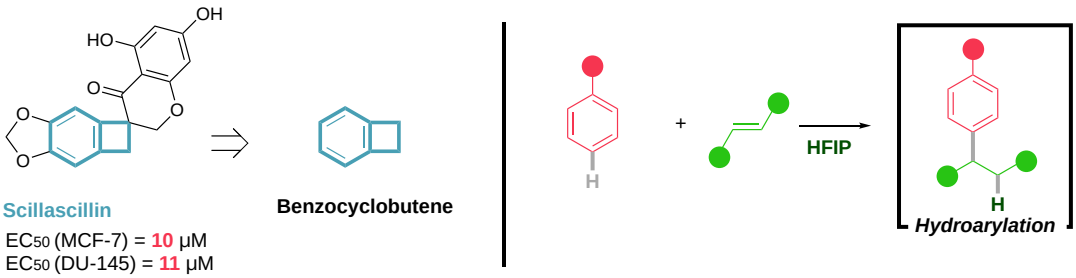


Figure 1. Antitumoral natural product Scillascillin showing Benzocyclobutene (left) and Hydroarylation of alkenes using HFIP.

Programme

We now propose to use conjugated dienes to access more complex structures under a Palladium-catalyzed process. This strategy would allow to develop a modular synthesis of strained benzocyclobutenes (Figure 2).

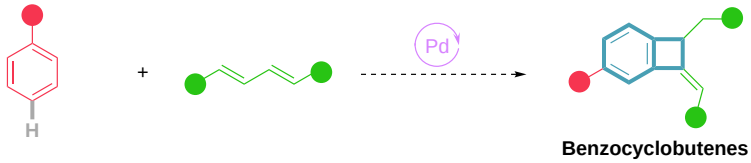


Figure 2. Pd-catalyzed access to bioactive Benzocyclobutenes

References

[1] (a) *Pharmacognosy Res.* **2014**, *6*. (b) *Planta Med* **2014**, *80*, 1053–1066.
[2] *Org. Lett.* **2024**, *26*, 834–838.
[3] *Nature Review Chemistry*, **2017**, *1*, 0088.
[4] (a) *ACS Catalysis*, **2020**, *10*, 6023-6029. (b) *Chem. Sci.*, **2023**, *14*, 12083-12090. (c) *JACS Au*, **2024**, *4*, 1744-1751.

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 ORGANICA
MENCIÓN DE MÁSTER EXCELENTE XUNTA DE GALICIA

PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2025-2026

DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE

Apellidos y nombre del director del proyecto: Ignacio Colomer Utrera	
Cargo: Científico Titular	
Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto: IQOG-CSIC	
Teléfono directo 91 258 7590	**e-mail** colomer@iqog.csic.es

DATOS DEL PROYECTO

Título: Lipopeptides as tools in supramolecular chemistry and catalysis.

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

Background

Nature has integrated ***supramolecular self-assembling structures*** where catalysis plays a key role, in connection with replication, encoding information, inheritability and evolution. A ***very attractive strategy*** to achieve ***self-assembly catalytic species*** relies on using phase separated precursors that react across the interface to form an ***amphiphilic product*** (i.e. micelles or vesicles), that catalyse an interfacial reaction to form their own components.[1] This mechanism forms compartments which allow for enclosure of chemical components and reactions. Within this context, we have recently published the synthesis and supramolecular characterization of ***amphiphilic small lipopeptides***,[2,3] that has allowed us to study their autocatalytic behaviour (Fig. 1).[4]

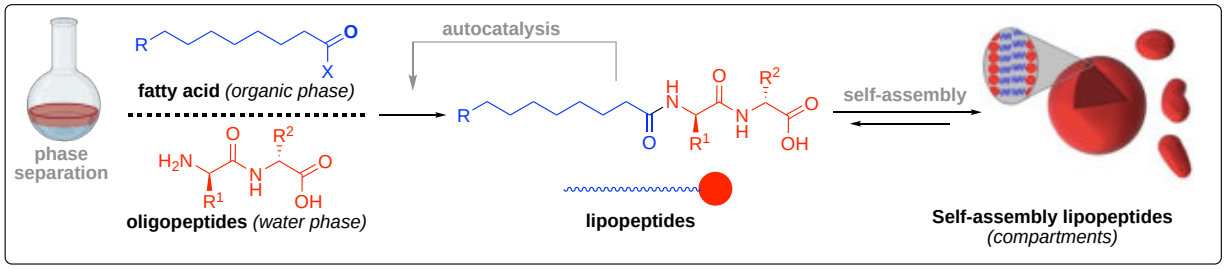


Figure 1. *Self-assembly lipopeptides: synthesis, supramolecular properties and autocatalysis*

Programme

Now, we propose to expand the toolbox of applications of lipopeptides to study their behaviour as catalysts, especially in combination with transition metal complexes in different transformations, such as C-H functionalization, cross-coupling or alkene functionalization (Fig. 2). The objectives of this project include:

1. Synthesis, isolation and characterize of lipopeptides.
2. Study of lipopeptides self-assembly.
3. Investigate the ability of lipopeptides to complex transition metals.
4. Explore catalytic activity of lipopeptides-metal complexes in H_2O.[5]

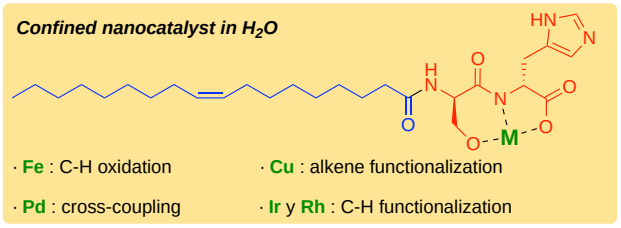


Figure 2: *Lipopeptidic transition-metal complexes as nanocatalysts*

References

[1] *Angew. Chem., Int. Ed.* **2013**, *52*, 12800–12826.
[2] *Org. Biomol. Chem.* ***2021****, 19, 6797–6803.*
[3] *Nat. Rev. Chem.* ***2023****, 7, 710–731.*
[4] *ChemSystemsChem* ***2025****, accepted.*
[5] (a) *Chemistry – A European Journal* **2018,** 24, 6672-6695. (b) *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 Interest in synthetic organic chemistry, supramolecular chemistry, catalysis and prebiotic chemistry to approach the challenging problem of the origin of life. Previous experience in organic chemistry laboratory. Desirable experience in NMR, HPLC, DLS, UV-Spect.

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

MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGANICA
MENCIÓN DE MÁSTER EXCELENTE XUNTA DE GALICIA

PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2025-2026

DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE

Apellidos y nombre del director(es) del proyecto: García Álvarez Isabel	
Cargo: Científico Titular	
Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto: Departamento de Síntesis, Estructura y Propiedades de Compuestos Orgánicos (SEPCO), Instituto de Química Orgánica General (IQOG-CSIC), C/Juan de la Cierva, 3, 28006 Madrid.	
Teléfono directo **91 258 75 96**	**e-mail** **garcia.alvarez@csic.es**

DATOS DEL PROYECTO

Título: Síntesis de antagonistas de receptores de glutamato para estudiar la señalización glutamatérgica en cerebro.
Breve descripción de los objetivos, contenido del proyecto y tareas a realizar - Diseño y síntesis de antagonistas de receptores de glutamato - Optimización de métodos *in vitro* para validad la unión de antagonistas a receptores de glutamato. Es un proyecto multidisciplinar, en el que principalmente se emplearán técnicas químicas y analíticas incluyendo la síntesis de nuevos compuestos con actividad biológica.
Capacidades y conocimientos recomendables que debe tener el estudiante para la realización de este proyecto Conocimientos en Química Orgánica, técnicas básicas de laboratorio de síntesis y caracterización estructural de compuestos orgánicos.
Indíquese cualquier otra aclaración que se considere que pueda ayudar a los estudiantes en la elección del TFM Existe un creciente interés científico y clínico en comprender cómo funciona el cerebro humano. Comprender cómo la señalización en el cerebro determina el comportamiento y el conocimiento humanos se ha convertido en uno los mayores desafíos científicos actuales. El glutamato es el principal neurotransmisor excitador en el cerebro, y la visualización de receptores de glutamato puede permitir el análisis de procesos neuronales de señalización que contribuyen a todos los fenómenos sensoriales y de conducta, así como a la caracterización de trastornos neurológicos. En este proyecto se desarrollará la síntesis de antagonistas de receptores de glutamato y se optimizarán métodos *in vitro* para validad su unión a receptores de glutamato.

MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGANICA
MENCIÓN DE MÁSTER EXCELENTE XUNTA DE GALICIA

PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2025-2026

DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE

<table>
<tr><td colspan="2">Apellidos y nombre del director(es) del proyecto:
TOLEDANO PINEDO, MIREIA
MARCO CONTELLES, JOSÉ LUIS</td></tr>
<tr><td colspan="2">Cargo:
CONTRATADA POST-DOCTORAL
PROFESOR DE INVESTIGACIÓN CSIC</td></tr>
<tr><td colspan="2">Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto:
SEPCO</td></tr>
<tr><td>Teléfono directo:
912587599
690391554</td><td>e-mail:
mireia.toledano@iqog.csic.es
jlmarco@iqog.csic.es</td></tr>
</table>

DATOS DEL PROYECTO

<table>
<tr><td>Título: Nuevas moléculas para la terapia de la enfermedad de Alzheimer</td></tr>
<tr><td>Breve descripción de los objetivos, contenido del proyecto y tareas a realizar: En este proyecto nos proponemos desarrollar nuevas aproximaciones basadas en la combinación de la química computacional (docking, dinámica molecular, etc.) con desarrollos experimentales para la identificación de nuevas entidades químicas para la posible terapia de la enfermedad de Alzheimer</td></tr>
<tr><td>Capacidades y conocimientos recomendables que debe tener el estudiante para la realización de este proyecto: Capacidad para trabajar en equipo. Conocimientos en química orgánica, síntesis orgánica y técnicas espectroscópicas</td></tr>
<tr><td>Indíquese cualquier otra aclaración que se considere que pueda ayudar a los estudiantes en la elección del TFM: ---</td></tr>
</table>

PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2025-2026

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

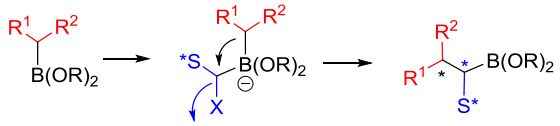
DATOS DEL PROYECTO

Título: Reactividad de ésteres borónicos con derivados de azufre enantiopuros (sulfóxidos, sulfoximinas, etc.)

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 ésteres borónicos tienen una reactividad muy interesante que se ha desarrollado con gran intensidad en los últimos años.[2] Gran parte de su reactividad se debe a que son ácidos de Lewis y, por tanto, 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 ésteres borónicos en una unidad de carbono.[3] Por otra parte, hay que destacar que los ésteres borónicos también pueden actuar como nucleófilos en determinadas condiciones de reacción.

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, entre otras, donde un sulfóxido, por ejemplo, se podría incorporar, como fragmento nucleófilo metalado, sobre un éster 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. También se explorarán adiciones de nucleófilos derivados de ésteres borónicos sobre especies insaturadas organosulfuradas (alquinil sulfóxidos, dienil sulfóxidos, etc.).



[1] (a) Wojaczyńska, E.; Wojaczyński, J. *Chem. Rev.* **2020**, *120*, 4578–4611. (b) Colomer, I.; Velado, M.; Fernández de la Pradilla, R.; 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 del Trabajo fin de Máster.

Máster universitario en Química Orgánica (M60)

Relación de Trabajos de Investigación ofertados en Instituto IMDEA ENERGÍA

CURSO ACADÉMICO 2025-2026

Director(es)	Título del proyecto
BIGLIONE, Catalina	*Valorización de CO_2 mediante carboxilación de alquinos terminales catalizada por MOFs*
LIRAS, Marta	*Diseño y síntesis de nuevos polímeros conjugados porosos para Fotosíntesis artificial*
MARCILLA, Rebeca; PATIL, Nagaraj	*Synthesis of novel redox-active conjugated porous polymers and their application in advanced batteries*
MARCILLA, Rebeca; SINGH, Vikram	*Development of Covalent Organic Frameworks (COFs) as active materials for sustainable batteries*
GÓMEZ MENDOZA, Miguel	*Materiales fotoactivos para llevar a cabo reacciones fotocatalíticas de oxidación / reducción de interés*

MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGANICA
MENCIÓN DE MÁSTER EXCELENTE XUNTA DE GALICIA

PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2025-2026

DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE

Apellidos y nombre del director(es) del proyecto: Catalina Biglione	
Cargo: Investigadora Titular	
Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto: Unidad de Materiales Porosos Avanzados, Fundación IMDEA Energía, Av. Ramón de la Sagra 3, 28935, Móstoles, Madrid.	
Teléfono directo 917371129	**e-mail** catalina.biglione@imdea.org

DATOS DEL PROYECTO

Título: Valorización de CO_2 mediante carboxilación de alquinos terminales catalizada por MOFs

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

La reacción de carboxilación de alquinos terminales representa una estrategia prometedora para la valorización del CO_2, generando productos de valor añadido bajo condiciones suaves. Para favorecer la reacción es necesario utilizar diferentes catalizadores (e.g. polímeros de coordinación porosos o MOFs).

Las tareas a realizar comprenden:

- Reacciones de carboxilación con CO_2 utilizando diferentes catalizadores heterogéneos
- Técnicas analíticas (cromatografías, PXRD, FTIR, NMR, técnicas de microscopía, etc.)

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

- Conocimientos de química orgánica y catálisis
- Interés por la incorporación de CO_2 en transformaciones orgánicas como estrategia de síntesis sostenible
- Familiaridad (o disposición para aprender) con técnicas de caracterización como DRX, RMN, IR, cromatografía
- Motivación para adquirir conocimientos y experiencia en catálisis heterogénea (no se requiere experiencia previa)

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

Este TFM se desarrollará íntegramente en la Fundación IMDEA Energía (Móstoles). En particular la estancia del estudiante será realizada en la Unidad de Materiales Porosos Avanzados. El estudiante trabajará en un contexto multidisciplinar y adquirirá distintas capacidades para su futuro profesional.

MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGANICA
MENCIÓN DE MÁSTER EXCELENTE XUNTA DE GALICIA

PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2025-2026

DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE

Apellidos y nombre del director(es) del proyecto: Marta Liras	
Cargo: Investigadora Senior	
Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto: Unidad de Procesos Fotoactivados, Fundación IMDEA Energía, Av. Ramón de la Sagra 3, 28935, Móstoles, Madrid.	
Teléfono directo 917371120 ext 105	**e-mail** marta.liras@imdea.org

DATOS DEL PROYECTO

Título: Diseño y síntesis de nuevos polímeros conjugados porosos para Fotosíntesis artificial

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 CO2 (para más aclaración ver, por ejemplo, Palenzuela et al. *Adv. Funct. Mater,* **2025** doi 10.1002/adfm.202509175, Mazuelo et al. *J Mater Chem. A* **2024**, 12, 1476; Palenzuela et al. *Adv. Funct. Mater*, **2024**, 34, 2403778; Naranjo et al *ACS Cat,* **2024,** 14, 283; García Eguizabal et al. *Small Structures* **2024**, *5*, 2300410).

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

- Conocimientos de química orgánica y catálisis
- Interés por la generación de combustibles solares
- Familiaridad (o disposición para aprender) con técnicas de caracterización como DRX, RMN, FTIR, FESEM
- Motivación para adquirir conocimientos y experiencia en catálisis heterogénea (no se requiere experiencia previa)

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

Este TFM se desarrollará íntegramente en la Fundación IMDEA Energía (Móstoles). En particular la estancia del estudiante será realizada en la Unidad de procesos Fotoactivados. El estudiante trabajará en un contexto multidisciplinar y adquirirá distintas capacidades para su futuro profesional. La posibilidad de continuar este TFM como estudiante de doctorado está abierta.

MASTERQO
MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGANICA
MENCIÓN DE MÁSTER EXCELENTE XUNTA DE GALICIA

UAM Universidad Autónoma de Madrid

UNIVERSIDAD COMPLUTENSE MADRID

USC UNIVERSIDADE DE SANTIAGO DE COMPOSTELA

XUNTA DE GALICIA

PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2025-26

DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE

Apellidos y nombre del director(es) del proyecto:

Dr. Rebeca Marcilla (Senior Researcher)

Dr. Nagaraj Patil (Senior Assistant)

Cargo:
Dr. Rebeca Marcilla (Senior Researcher)

Dr. Nagaraj Patil (Senior Assistant)

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

IMDEA ENERGY Institute, Electrochemical Processes Unit (ECPU), Parque tecnológico de Móstoles, c/ Ramón de la Sagra, 3 28935 Móstoles MADRID

Teléfono directo: 917371131	**e-mail: Nagaraj.patil@imdea.org, rebeca.marcilla@imdea.org**

DATOS DEL PROYECTO

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

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

The quest to build safe, low-cost, sustainable, high-energy and large-scale electrochemical energy storage (EES) devices, such as Li / Na / Zn^{+2}/ Al^{+3}-ion batteries feeds an ever-growing interest in developing novel redox-active polymer (RAP) to be used as sustainable electrode materials for those next-generation batteries. To this end, numerous RAPs have been developed and effectively used as OEMs in EES devices, but most of them are based on linear polymers.[1,2] Recently, redox-active microporous polymers including amorphous conjugated porous polymers (CMP) 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.[3,4] 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. Syntheses of conjugated microporous polymers (CMPs) incorporating redox-active quinones/nitroxide radicals/imides/carboxylates. etc. by different coupling reactions (for instance, Sonogashira cross-coupling reaction, etc.).

2. Physico–chemical, textural and morphological characterization of polymers using relevant analytical techniques.

3. Fundamental electrochemical characterization of polymers by cyclic voltammetry and impedance spectroscopy, etc.

4. Assembling and testing of various batteries (Li-ion, Zn-ion, aqueous batteries, etc.).

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 S. Muench, A. Wild, C. Friebe, B. Häupler, T. Janoschka and U. S. Schubert, *Chem. Rev.*, 2016, **116**, 9438–9484.
2 P. Poizot, J. Gaubicher, S. Renault, L. Dubois, Y. Liang and Y. Yao, *Chem. Rev.*, 2020, acs.chemrev.9b00482.
3 T. Sun, J. Xie, W. Guo, D. Li and Q. Zhang, *Adv. Energy Mater.*, 2020, **10**, 1904199.
4 A. Molina, N. Patil, E. Ventosa, M. Liras, J. Palma and R. Marcilla, *Adv. Funct. Mater.*, 2020, **30**, 1908074.

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 basic knowledge in organic synthesis, structural elucidation through physico-chemical characterization techniques, etc. If he/she knows the basics of polymer synthesis and characterization would be ideal, but not mandatory.

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

Fecha: 18/06/2025

Firma de los directores del proyecto:

Dra. Rebeca Marcilla

MASTERQO
MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGANICA
MENCIÓN DE MÁSTER EXCELENTE XUNTA DE GALICIA

UAM Universidad Autónoma de Madrid

UNIVERSIDAD COMPLUTENSE MADRID

USC UNIVERSIDADE DE SANTIAGO DE COMPOSTELA

XUNTA DE GALICIA

PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2025-26

DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE

Apellidos y nombre del director(es) del proyecto:

Dr. Rebeca Marcilla (Senior Researcher)

Dr. Vikram Singh (Senior Assistant Researcher)

Cargo:
Dr. Rebeca Marcilla (Senior Researcher)

Dr. Vikram Singh (Senior Assistant Researcher)

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

IMDEA ENERGY Institute, Electrochemical Processes Unit (ECPU), Parque tecnológico de Móstoles, c/ Ramón de la Sagra, 3 28935 Móstoles MADRID

Teléfono directo: 917371131	**e-mail: rebeca.marcilla@imdea.org, vikram.singh@imdea.org**

DATOS DEL PROYECTO

Título: Development of Covalent Organic Frameworks (COFs) as active materials for sustainable batteries

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

Covalent Organic Frameworks (COFs) have emerged as a highly promising class of crystalline porous materials for next-generation energy storage systems, particularly as active materials for battery electrodes. Their unique structural characteristics—such as high surface area, tunable porosity, and the ability to precisely integrate redox-active sites—offer a versatile platform for facilitating efficient charge storage and transport. Unlike traditional inorganic materials, COFs are composed entirely of light elements connected by strong covalent bonds, enabling structural tailorability and chemical versatility. These properties make COFs attractive candidates for various battery chemistries, including lithium-ion, sodium-ion, and metal–air systems, where both the performance and sustainability of the electrodes are crucial. Recent research has focused on designing conductive and redox-active COFs to overcome intrinsic limitations in electronic conductivity, thereby advancing their practical application in rechargeable battery technologies.

In this project, we aim to develop innovative COFs to be used as high performing electrodes in battery applications.

The main objectives of this project are:

1. Syntheses of covalent organic frameworks (COFs) incorporating redox-active quinones/nitroxide radicals/imides/carboxylates. etc. by different coupling reactions.

2. Physico–chemical, textural and morphological characterization of polymers using relevant analytical techniques.

3. Fundamental electrochemical characterization of COFs by cyclic voltammetry and impedance spectroscopy, etc.

4. Assembling and testing of various batteries (Li-ion, Zn-ion, aqueous batteries, etc.).

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.

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 basic knowledge in organic synthesis, structural elucidation through physico-chemical characterization techniques, etc. If he/she knows the basics of polymer synthesis and characterization would be ideal, but not mandatory.

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

Fecha: 18/07/2025

Firma de los directores del proyecto:

Dra. Rebeca Marcilla

MASTERQO
MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGANICA
MENCIÓN DE MÁSTER EXCELENTE XUNTA DE GALICIA

UAM Universidad Autónoma de Madrid

UNIVERSIDAD COMPLUTENSE MADRID

USC UNIVERSIDADE DE SANTIAGO DE COMPOSTELA

XUNTA DE GALICIA

PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2025-2026

DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE

Apellidos y nombre del director(es) del proyecto: Dr. Miguel Gómez Mendoza	
Cargo: Investigador Titular	
Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto: Unidad de Procesos Fotoactivados del Instituto IMDEA ENERGÍA. Avda. Ramón de la Sagra, 3 Parque Tecnológico de Móstoles E-28935 Móstoles, Madrid.	
Teléfono directo 917371120105	**e-mail** miguel.gomez@imdea.org

DATOS DEL PROYECTO

Título: Materiales fotoactivos para llevar a cabo reacciones fotocatalíticas de oxidación / reducción de interés.

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

Los métodos tradicionales para la obtención de compuestos de interés industrial como el fenol (>850.000 t/año) requieren el uso de alta temperatura, alta presión, y condiciones ácidas fuertes. En los últimos años, se ha demostrado que mediante procesos fotocatalíticos empleando luz visible se pueden llevar a cabo tales procesos. Sin embargo, aún existe el desafío de aumentar la eficiencia de esta tecnología y de buscar materiales fotoactivos que sean más eficientes y de bajo coste.

Otro proceso de interés se basa en la Fotosíntesis Artificial. Esta tecnología se basa en el uso de luz solar para convertir CO_2 y agua en compuestos útiles para la energía como CO, metano, metanol e hidrógeno, tal como lo hacen las plantas verdes para la obtención de azúcares. En nuestro grupo de investigación trabajamos para desarrollar una nueva generación de materiales híbridos organo-inorgánicos que sean capaces de promover de manera eficiente, mediante reacciones fotocatalíticas y fotoelectroquímicas, las transformaciones químicas necesarias en los procesos mencionados anteriormente.

El principal objetivo del trabajo final de MASTER es el estudio de procesos de interés de industrial (como la oxidación de fenol) vía fotocatalítica. Para ello se emplearán diferentes fotocatalizadores orgánico-inorgánico que se caracterizarán a través de técnicas espectroscópicas avanzadas. Para lograr el objetivo principal se desarrollarán los siguientes objetivos específicos:

* Preparación de un fotosensibilizador adecuado que se caracterizará fotofísicamente mediante técnicas espectroscópicas tales como UV-Visible, fotoluminiscencia y absorción transitoria (TAS).
* Estudio del rendimiento de los procesos fotocatalíticos llevados a cabo.
* Identificación mediante cromatografía de gases-masas de los intermedios y productos finales de reacción.
* Identificación mediante TAS de posibles especies involucradas en las vías de reacción fotocatalíticas.

Herramientas a disposición del alumno/a:

El/la alumno/a aprenderá el manejo de técnicas espectroscópicas de caracterización estructural como la resonancia magnética nuclear (RMN); así como la cromatografía líquida y de gases. Dentro del marco de las técnicas fotofísicas, se emplearán la fotoluminiscencia en estado estacionario y resolución temporal, así como la absorción transitoria.

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

Química Orgánica y Fotocatálisis

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 2025-2026

Director(es)	Título del Proyecto
Naranjo, T. y Pérez, E.M.	Síntesis y estudio de derivados quirales de MINTs (mechanically interlocked single-walled carbon nanotubes)
Naranjo, T. y Pérez, E.M.	Estudio del efecto de la quiralidad sobre la selectividad de espín en materiales bidimensionales funcionalizados con moléculas quirales

MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGANICA
MENCIÓN DE MÁSTER EXCELENTE XUNTA DE GALICIA

PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2025-2026

DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE

Apellidos y nombre del director(es) del proyecto: Teresa Naranjo Sánchez y Emilio M. Pérez	
Cargo: Research staff scientist, Senior Research Prof.	
Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto: C. Faraday, 9, Fuencarral-El Pardo, 28049 Madrid	
Teléfono directo 912 99 87 00 ext 8838	**e-mail** teresa.naranjo@imdea.org; emilio.perez@imdea.org

DATOS DEL PROYECTO

Título: Síntesis y estudio de derivados quirales de MINTs (mechanically interlocked single-walled carbon nanotubes)

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

Este Trabajo Fin de Máster se enmarca en el estudio de nanomateriales basados en nanotubos de carbono de pared simple (SWNTs), modificados químicamente para incorporar estructuras moleculares complejas. A través del diseño y la síntesis de sistemas mecánicamente entrelazados (MINTs, acrónimo del inglés mechanically interlocked single-walled carbon nanotubes), el proyecto combina elementos de química orgánica y nanotecnología, con el objetivo de explorar nuevas propiedades funcionales.

A escala nanométrica, los materiales muestran propiedades muy distintas a las de los materiales a granel, debido principalmente a dos factores: el aumento drástico de la proporción de átomos en la superficie y los efectos del confinamiento cuántico. Estas características modifican sus propiedades electrónicas, ópticas y químicas, ofreciendo oportunidades únicas para desarrollar nuevas aplicaciones en ciencia de materiales.

El objetivo concreto del proyecto es la síntesis y caracterización de derivados mecánicamente entrelazados con nanotubos de carbono (MINTs), desarrollados por primera vez en nuestro grupo de investigación. Para ello, el estudiante sintetizará nuevas moléculas con forma de “U” diseñadas específicamente para rodear y enlazar mecánicamente con los nanotubos, formando así los MINTs. Estas moléculas incorporarán funciones quirales, fotoactivas, electroactivas y otros grupos funcionales útiles para su posterior modificación. Tras la síntesis, se caracterizarán las moléculas y los sistemas MINTs mediante técnicas espectroscópicas y estructurales, y se estudiarán sus propiedades, con especial interés en la influencia de la quiralidad a escala nanométrica.

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

Interés por la síntesis orgánica, caracterización espectroscópica y aplicaciones en nanotecnología.
Se valorará familiaridad con técnicas espectroscópicas y motivación para aprender en un entorno interdisciplinar.

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

Este TFM se llevará a cabo en el grupo de investigación Chemistry of Low-Dimensional Materials del Instituto IMDEA Nanociencia, dentro del proyecto nacional PID2023-152267NB-I00, financiado por el Ministerio de Ciencia, Innovación y Universidades

MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGANICA
MENCIÓN DE MÁSTER EXCELENTE XUNTA DE GALICIA

PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2025-2026

DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE

Apellidos y nombre del director(es) del proyecto: Teresa Naranjo Sánchez y Emilio M. Pérez	
Cargo: Research staff scientist, Senior Research Prof.	
Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto: C. Faraday, 9, Fuencarral-El Pardo, 28049 Madrid	
Teléfono directo 912 99 87 00 ext 8838	**e-mail** teresa.naranjo@imdea.org; emilio.perez@imdea.org

DATOS DEL PROYECTO

Título: Estudio del efecto de la quiralidad sobre la selectividad de espín en materiales bidimensionales funcionalizados con moléculas quirales

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

La quiralidad desempeña un papel clave en física, química y biología, y puede influir en el espín de los electrones mediante el fenómeno conocido como CISS (Chiral-Induced Spin Selectivity). Este proyecto se centra en estudiar dicho efecto en materiales bidimensionales (TMDs) funcionalizados con moléculas quirales, utilizando un enfoque interdisciplinar que combina síntesis orgánica, ciencia de superficies y espectroscopía avanzada.

El objetivo principal del TFM será la síntesis de una colección de maleimidas quirales, diseñadas específicamente para anclarse de forma covalente a materiales 2D mediante una adición de tipo Michael sobre enlaces S. Se sintetizarán derivados con diferentes distancias entre el centro quiral y el grupo maleimida, lo que permitirá estudiar cómo esta variación afecta al acoplamiento y al efecto CISS. Se prepararán tanto compuestos enantioespecíficos como racémicos, y su pureza óptica se caracterizará mediante dicroísmo circular (CD) y cromatografía HPLC quiral.

Paralelamente, a través de técnicas como espectroscopía de fotoemisión resuelta en espín, medidas de transporte y microscopía STM/STS en ultra alto vacío (UHV), se estudiará cómo la estructura molecular, el tipo de enlace y las propiedades del sustrato influyen en el transporte de espín. Esto permitirá avanzar hacia una comprensión más profunda del CISS y su potencial aplicación en dispositivos espintrónicos sin campos magnéticos, así como en la elucidación de procesos biológicos relacionados con la transferencia de electrones.

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

Interés por la síntesis orgánica, caracterización espectroscópica y aplicaciones en nanotecnología.
No se requiere experiencia previa en física de superficies, pero se valorará la motivación para colaborar en un entorno interdisciplinar.

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

El desarrollo de este TFM se realizará en el grupo Chemistry of Low-Dimensional Materials del Instituto IMDEA Nanociencia, en el marco del proyecto nacional PID2023-152267NB-I00, financiado por el Ministerio de Ciencia, Innovación y Universidades.

MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGANICA
MENCIÓN DE MÁSTER EXCELENTE XUNTA DE GALICIA

PROPUESTAS DE EMPRESAS COLABORADORAS

CURSO ACADÉMICO 2025–2026

EMPRESA	TÍTULO / Director(es)
Lilly	*Desarrollo y optimización de la reacción de Schmidt en plataformas de química de flujo, aplicado a la preparación de alquil lactamas de interés en química médica.* GARCIA-LOSADA, Pablo
Lilly	*Evaluación de la nitro reductasas para la preparación de aminas heterocíclicas: expansión de la reacción para su desarrollo como alternativa sostenible al uso de reducción catalizada por metales de transición* GARCIA-LOSADA, Pablo
FAMAR	*Investigación y desarrollo de formas farmacéuticas de aplicación farmacológica* SANCLIMENS, Gloria

MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGANICA
MENCIÓN DE MÁSTER EXCELENTE XUNTA DE GALICIA

PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2025-2026

DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE

Apellidos y nombre del director(es) del proyecto: Garcia Losada, Pablo	
Cargo: **Sr. Director Research, Eli Lilly Reasearch Labs** **Lilly Small Molecule Discovery** **Av. de la Industria, 30. Alcobendas 28108 Madrid. España**	
Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto: Lilly Small Molecule Discovery - Alcobendas	
Teléfono directo **+34 91 623 35 99 / +34 677 94 00 33**	**e-mail** garcia-losada_pablo@lilly.com

DATOS DEL PROYECTO

Título: Desarrollo y optimización de la reacción de Schmidt en plataformas de química de flujo, aplicado a la preparación de alquil lactamas de interés en química médica.

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

El reordenamiento de Schmidt desempeña un papel fundamental en la síntesis de lactámicos, que son amidas cíclicas ampliamente utilizadas como building blocks de construcción en productos farmacéuticos, en particular antibióticos β-lactámicos y otros heterociclos que contienen nitrógeno1. Esta reacción permite la expansión del anillo de cetonas cíclicas a través de la inserción de un átomo de nitrógeno, generalmente usando ácido hidrazoico o azidas orgánicas en condiciones ácidas. El proceso implica la formación de un intermedio azido, seguido de un desplazamiento-1,2 y la eliminación del gas nitrógeno, lo que finalmente da lugar a la formación del anillo lactama. Su utilidad radica en su capacidad para construir anillos de tamaño mediano a grande con alta eficiencia y tolerancia de grupo funcional.

Sin embargo, debido a la naturaleza explosiva y tóxica de las azidas, especialmente el ácido hidrazoico, se deben seguir estrictos protocolos de seguridad, que incluyen control de temperatura, ventilación adecuada y evitar superficies metálicas que puedan catalizar la descomposición2. Esta combinación de potencia sintética y sensibilidad de seguridad hace que el reordenamiento de Schmidt sea una herramienta valiosa y exigente en la síntesis orgánica moderna, con un gran potencial de aplicación usando la tecnología de química de flujo para controlar y manejar los aspectos de seguridad asociados 3.

Los objetivos principales de este Trabajo Fin de Máster son:

- Validación y optimización de la reacción de Schmidt con cetona y derivado de azida alquílico: aplicación a la síntesis de alquil lactamas a partir de cetonas alquílicas y aromáticas (ej.: hetero aromáticas, bencílicas, etc..).
- Estudio de las diferentes condiciones de reacción para su posterior aplicación a procesos automatizados de química en plataformas de flujo para control de los parámetros de seguridad asociadas a las especies azida y derivados de las mismas.

- 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 con equipos de batch y Flow chmistry
- Análisis e interpretación de los resultados
- extracción de conclusiones y elaboración de hipótesis para posteriores experimentos

[1] Schmidt, K. F. Ber. dtsch. Chem. Ges. 1924, 57, 704–706.
[2] J. Am. Chem. Soc., 2000, 122, 7226-7232; J. Org. Chem., 2012, 77, 5364-5370.
[3] Org. Process Res. Dev. 2021, 25, 148−156

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

Experiencia previa en tareas de diseño, síntesis, purificación y caracterización estructural de compuestos orgánicos. Capacidad de trabajar en equipo y entusiasmo por la investigación y la aplicación de la tecnología a la síntesis orgánica. Sería deseable tener experiencia en síntesis orgánica, en particular en el manejo de materiales o reacciones sensibles al aire y al agua

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. El centro de investigación de Eli Lilly en Madrid es un laboratorio puntero que une química médica, sintética (incluyendo laboratorios avanzado de química de flujo y de síntesis en paralelo), analítica y computacional con técnicas de biofísica y biología celular en la búsqueda de nuevas medicinas. Los estudiantes que trabajen en el centro tendrán la oportunidad de conocer a expertos de cada área científica, ayudándoles a conocer el ámbito de la investigación farmacéutica

MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGANICA
MENCIÓN DE MÁSTER EXCELENTE XUNTA DE GALICIA

PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2025-2026

DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE

Apellidos y nombre del director(es) del proyecto: Garcia Losada, Pablo	
Cargo: **Sr. Director Research, Eli Lilly Reasearch Labs** **Lilly Small Molecule Discovery** **Av. de la Industria, 30. Alcobendas 28108 Madrid. España**	
Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto: Lilly Small Molecule Discovery - Alcobendas	
Teléfono directo **+34 91 623 35 99 / +34 677 94 00 33**	**e-mail** garcia-losada_pablo@lilly.com

DATOS DEL PROYECTO

Título: Evaluación de la nitro reductasas para la preparación de aminas heterocíclicas: expansión de la reacción para su desarrollo como alternativa sostenible al uso de reducción catalizada por metales de transición

Las nitroreductasas son una clase de enzimas dependientes de flavina que catalizan la reducción de grupos nitro a aminas utilizando NAD(P)H como agente reductor. Estas enzimas se han convertido en potentes biocatalizadores en química sintética debido a su amplio alcance de sustrato, condiciones de reacción suaves y perfiles respetuosos con el medio ambiente[1]. En química sintética, las nitroreductasas son particularmente valiosas para la reducción selectiva de compuestos nitroaromáticos y nitroalifáticos, lo que permite la síntesis eficiente de aminas aromáticas y alifáticas, compuestos azoxi y azoicos, y N-heterociclos, todos los cuales son motivos fundamentales en la ciencia farmacéutica, agroquímica y de materiales[2]. Su capacidad para funcionar en condiciones acuosas de baja temperatura los convierte en alternativas atractivas a las reducciones tradicionales catalizadas por metales, que a menudo requieren reactivos agresivos y generan residuos tóxicos. Además, las nitroreductasas se están diseñando cada vez más para mejorar la selectividad y la actividad, ampliando su utilidad en la síntesis asimétrica y la funcionalización en etapa tardía de moléculas complejas.

A pesar de su promesa, persisten desafíos. Algunas nitroreductasas exhiben una actividad limitada hacia sustratos ricos en electrones, y su rendimiento puede ser menor que el de los procesos quimiocatalíticos. Sin embargo, las nitroreductasas ejemplifican la convergencia de la precisión biológica y la utilidad sintética, ofreciendo vías sostenibles para compuestos que contienen nitrógeno a los que de otro modo sería difícil acceder. Su papel cada vez más importante en la química sintética subraya un cambio más amplio hacia la innovación biocatalítica en la construcción moderna de moléculas

-Los objetivos principales de este Trabajo Fin de Máster son:

- Validación de la reacción de la reducción catalizada por nitroreductasas para la preparación de derivados de anilina/hetero-anilinas altamente reactivos a las condiciones catalizadas por metales de transición, en condiciones acuosas y a baja temperatura.
- Estudio de las diferentes condiciones de reacción para su posterior aplicación a procesos automatizados de química en paralelo.
- 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

[1] *ChemCatChem 2025, 17, e202401304 (2 of 19)*
[2] *ACS Green Chemistry Institute – Reagent Guide V 4.0*

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

Experiencia previa en tareas de diseño, síntesis, purificación y caracterización estructural de compuestos orgánicos. Capacidad de trabajar en equipo y entusiasmo por la investigación y la aplicación de la tecnología a la síntesis orgánica. Sería deseable tener experiencia en síntesis orgánica, en particular en el manejo de materiales o reacciones sensibles al aire y al agua

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. El centro de investigación de Eli Lilly en Madrid es un laboratorio puntero que une química médica, sintética (incluyendo laboratorios avanzado de química de flujo y de síntesis en paralelo), analítica y computacional con técnicas de biofísica y biología celular en la búsqueda de nuevas medicinas. Los estudiantes que trabajen en el centro tendrán la oportunidad de conocer a expertos de cada área científica, ayudándoles a conocer el ámbito de la investigación farmacéutica

MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGANICA
MENCIÓN DE MÁSTER EXCELENTE XUNTA DE GALICIA

PROPUESTA DE TRABAJO EXPERIMENTAL (TFM) 2025-2026

DATOS DEL DIRECTOR DEL PROYECTO Y DE LA ENTIDAD OFERTANTE

Apellidos y nombre del director(es) del proyecto: Gloria Sanclimens	
Cargo: Directora de I+D	
Departamento, organismo al que pertenece y dirección postal donde se desarrollará el proyecto: Unidad de Negocio de I+D, FAMAR HEALTHCARE	
Teléfono directo 649736442	**e-mail** g.sanclimens@famar-group.com

DATOS DEL PROYECTO

Título:

Investigación y desarrollo de formas farmacéuticas de aplicación farmacológica

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

1. Investigación y desarrollo de fórmulas para diversas formas farmacéuticas: oftálmico, spray nasal, cápsula, comprimido, inyectable….
2. Desarrollo de proceso de fabricación de dichas fórmulas
3. Desarrollo de técnicas analíticas de caracterización de dichas formas farmacéuticas
4. Desarrollo y validación de métodos de análisis
5. Estudios CMC (química, fabricación y control) necesarios para el desarrollo de un fármaco
6. Trabajo en un entorno farmacéutico de acuerdo a estándares de calidad y guías regulatorias aplicables

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

1. Conocimientos químicos básicos
2. Algún tiempo de experiencia en laboratorios químico y/o farmacéutico para cierta autonomía en trabajo experimental
3. Capacidad de aprendizaje
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