

Este documento debe ser entregado por el director en la Secretaría del Departamento dentro del plazo establecido, para su remisión a la Comisión de Garantía de la Calidad del Máster

ANEXO I

PROPUESTA DE TRABAJO FIN DE MÁSTER EN QUÍMICA MOLECULAR Y CATÁLISIS HOMOGÉNEA

CURSO ACADÉMICO: 2017-18

DEPARTAMENTO RESPONSABLE: QUÍMICA ORGÁNICA

TÍTULO DEL TFM:

Aproximación supramolecular a la preparación de copolímeros bloque anfífilos
Supramolecular approach to the preparation of amphiphilic block copolymers

	Apellidos, Nombre	Centro y categoría	Doctor (si/no)	Email	Teléfono
Director	ORIO L LANGA, LUIS	FACULTAD DE CIENCIAS / CU	SI	loriol@unizar.es	943785
Director	PIÑOL LACAMBRA, MILAGROS	FACULTAD DE CIENCIAS / TU	SI	mpinol@unizar.es	842279
Ponente					

Lugar previsto para la realización del TFM:

Facultad de Ciencias:

Otro:

Breve descripción de los Objetivos y del Plan de trabajo a desarrollar por el alumno:

(Comente las tareas a realizar, técnicas a utilizar, etc. **Máximo 250 palabras**). Además, de acuerdo con lo expuesto en las directrices propias de su Máster, si es el caso:

- Justifique la necesidad de un segundo Director
- Si de forma extraordinaria el TFM está afectado por un acuerdo de confidencialidad, justifique las razones y aporte la documentación requerida

El objetivo del trabajo es la preparación de nuevos copolímeros bloque anfífilos mediante el reconocimiento por enlace de hidrógeno. El acoplamiento de homopolímeros mediante interacciones por enlace de hidrógeno es una estrategia versátil ya que permite acceder a un elevado número de copolímeros siempre que los extremos hayan sido adecuadamente modificados con unidades complementarias. El trabajo consistirá en la preparación de dos polímeros modificados en un extremo con un receptor de Hamilton y ácido cianúrico (capaces de formar seis enlaces de hidrógeno) y del correspondiente copolímero supramolecular. Dado su carácter anfífilo, el copolímero resultante puede formar en agua micelas o vesículas en agua que se pueden utilizar como nanotransportadores de moléculas pequeñas, como fármacos.

Con este trabajo el estudiante aprenderá a desenvolverse en un laboratorio de síntesis orgánica, con tareas dirigidas a la síntesis de intermedios y/o monómeros orgánicos, así como a la optimización de reacciones de polimerización y de funcionalización de macromoléculas.

Trabajaré las técnicas de cromatografía y caracterización estructural (RMN, IR, MS) para purificar e identificar compuestos de bajo peso molecular.

Trabajaré y adquiriré conocimientos en Química Macromolecular y Supramolecular, específicamente en la preparación y la caracterización de polímeros, y en técnicas de análisis térmico (DSC y TGA).

Asimismo, se estudiará el autoensamblaje de estos polímeros en disolución acuosa utilizando, principalmente, técnicas de microscopía electrónica.

En este trabajo se combina una importante carga sintética en macromoléculas con técnicas de caracterización y de estudio de autoensamblaje de los copolímeros preparados, por lo que se combinan la experiencia de ambos investigadores en estas temáticas.

En Zaragoza, 17 de JULIO de 20 17

(La propuesta deberá estar firmada por los directores y el ponente, en su caso, y contar con el VºBº del Departamento responsable)

Fdo.: **LUIS ORIO L LANGA**
Director

Fdo.: **MILAGROS PINOL**
Director

Fdo.:
Ponente

Vº Bº
El Director del Departamento de
Química Orgánica
Vº Bº
Fdo.: **Joaquín M. Barberá Gracia**

Fdo.:
Director del Departamento de

Título

Aproximación supramolecular a la preparación de copolímeros bloque anfífilos

Directores

Luis Oriol Langa

Milagros Piñol Lacambra

Resumen

El objetivo del trabajo es la preparación de nuevos copolímeros bloque anfífilos mediante el reconocimiento por enlace de hidrógeno. El acoplamiento de homopolímeros mediante interacciones por enlace de hidrógeno es una estrategia versátil ya que permite acceder a un elevado número de copolímeros siempre que los extremos hayan sido adecuadamente modificados con unidades complementarias. El trabajo consistirá en la preparación de dos polímeros modificados en un extremo con un receptor de Hamilton y ácido cianúrico (capaces de formar seis enlaces de hidrógeno) y del correspondiente copolímero supramolecular. Dado su carácter anfífilo, el copolímero resultante puede formar en agua micelas o vesículas que se pueden utilizar como nanotransportadores de moléculas pequeñas, como fármacos.

Con este trabajo el estudiante aprenderá a desenvolverse en un laboratorio de síntesis orgánica, con tareas dirigidas a la síntesis de intermedios y/o monómeros orgánicos, así como a la optimización de reacciones de polimerización y de funcionalización de macromoléculas. Trabajaré las técnicas de cromatografía y caracterización estructural (RMN, IR, MS) para purificar e identificar compuestos de bajo peso molecular. Trabajaré y adquiriré conocimientos en Química Macromolecular y Supramolecular, específicamente en la preparación y la caracterización de polímeros, y en técnicas de análisis térmico (DSC y TGA).

Este documento debe ser entregado por el director en la Secretaría del Departamento dentro del plazo establecido, para su remisión a la Comisión de Garantía de la Calidad del Máster

ANEXO I

PROPUESTA DE TRABAJO FIN DE MÁSTER EN QUÍMICA MOLECULAR Y CATÁLISIS HOMOGÉNEA

CURSO ACADÉMICO: 2017-2018

DEPARTAMENTO RESPONSABLE: Química Orgánica

TÍTULO DEL TFM:

Materiales supramoleculares basados en moléculas de tipo bent-core: Síntesis, preparación y caracterización.
Supramolecular materials based on bent-core molecules: Synthesis, preparation and characterization.

	Apellidos, Nombre	Centro y categoría	Doctor (si/no)	Email	Teléfono
Director	ROS LATIENDA, M BLANCA	FAC. CIENCIAS/ICMA. CU	SI	bros@unizar.es	842277
Director					
Ponente					

Lugar previsto para la realización del TFM:

Facultad de Ciencias:



Otro:

Breve descripción de los Objetivos y del Plan de trabajo a desarrollar por el alumno:

(Comente las tareas a realizar, técnicas a utilizar, etc. **Máximo 250 palabras**). Además, de acuerdo con lo expuesto en las directrices propias de su Máster, si es el caso:

- Justifique la necesidad de un segundo Director
- Si de forma extraordinaria el TFM está afectado por un acuerdo de confidencialidad, justifique las razones y aporte la documentación requerida

Objetivo: Controlar el autoensamblaje de moléculas de tipo bent-core con el fin de obtener diferentes tipos de materiales supramoleculares nanoestructurados.

Motivación: En este proyecto fin de máster se pretende avanzar en la relación estructura química - organización supramolecular con moléculas de estructura curvada denominadas de tipo bent-core, con propiedades muy diferenciadoras y atractivas en el campo de los cristales líquidos termótropos, pero muy poco estudiadas en otros campos de los materiales supramoleculares.

A través de la puesta a punto de procesos sintéticos covalentes versátiles, se pretende obtener moléculas de geometría curvada (de tipo bent-core) capaces de generar diferentes sistemas supramoleculares, en bulk y en presencia de disolventes, que proporcionen diferentes tipos de materiales de gran potencial en el campo de los materiales avanzados y de la nanomateriales.

Para la consecución de este objetivo, se proponen moléculas anfífilas de tipo bent-core, bloques moleculares muy poco estudiados en algunos de estos aspectos y sin embargo de gran interés por sus resultados preliminares [1, 2]. Debido a su dual naturaleza hidrófoba-hidrófila, se pretende que los bloques moleculares induzcan procesos de nanosegregación, tanto en bulk como en presencia de disolventes, especialmente en agua, proporcionando diferentes materiales blandos: cristales líquidos, geles físicos o nanoagregados de destacable actualidad y potencial.

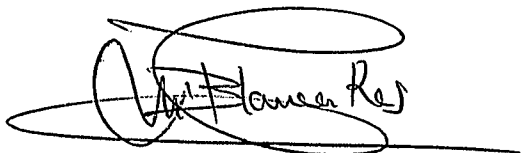
Actividades: El proyecto de investigación implicará la síntesis de una serie de moléculas orgánicas de tipo bent-core anfífilas mediante rutas sintéticas con diferentes etapas y la caracterización de los diferentes compuestos intermedios y finales mediante el uso de técnicas espectroscópicas y analíticas (UV, FTIR, RMN, EM, etc.). Utilizando estas moléculas y metodologías de auto-ensamblaje, se trabajará en la fabricación y la optimización de protocolos experimentales para la preparación y el control de las propiedades de los diferentes materiales blandos. La estructura de los materiales supramoleculares obtenidos se caracterizará con técnicas apropiadas como microscopías óptica y electrónica (POM, SEM y TEM), calorimetría y de difracción de RX en polvo.

[1] M. B. Ros et al., Angew. Chem. Int. Ed. 2014, 53, 13449 –13453.

[2] a) J. Etxebarria and M. B. Ros, J. Mater. Chem., 2008, 18, 2919-2926. b) N. A. Clark et al., Science 2009, 325, 456-460.

En Zaragoza, 17 de julio de 2017

(La propuesta deberá estar firmada por los directores y el ponente, en su caso, y contar con el VºBº del Departamento responsable)



Fdo.: M Blanca Ros
Director

Fdo.:
Director

Fdo.:
Ponente

VºBº

Vº Bº
El Director del Departamento de
Química Orgánica

Fdo.:
Director del Departamento de

Fdo.: Joaquín M. Barberá Gracia



Este documento debe ser entregado por el director en la Secretaría del Departamento dentro del plazo establecido, para su remisión a la Comisión de Garantía de la Calidad del Máster

ANEXO I

PROPUESTA DE TRABAJO FIN DE MÁSTER EN

QUÍMICA MOLECULAR Y CATALISIS HOMOGÉNEA

CURSO ACADÉMICO: 2017-2018

DEPARTAMENTO RESPONSABLE: Química Orgánica

TÍTULO DEL TFM:

Síntesis de sondas fluorescentes y estudio de encapsulación y liberación controlada con nanotransportadores basados en copolímeros de bloque

	Apellidos, Nombre	Centro y categoría	Doctor (si/no)	Email	Teléfono
Director	Oriol Langa, Luis	Ciencias - Catedrático	si	loriol@unizar.es	843785
Director	del Barrio Lasheras, Jesús	INA - Investigador Ramón y Cajal	si	jdb529@unizar.es	845388
Ponente					

Lugar previsto para la realización del TFM:

Facultad de Ciencias:

Otro:

Breve descripción de los Objetivos y del Plan de trabajo a desarrollar por el alumno:

(Comente las tareas a realizar, técnicas a utilizar, etc. **Máximo 250 palabras**). Además, de acuerdo con lo expuesto en las directrices propias de su Máster, si es el caso:

- Justifique la necesidad de un segundo Director
- Si de forma extraordinaria el TFM está afectado por un acuerdo de confidencialidad, justifique las razones y aporte la documentación requerida

En el desarrollo de nuevos fármacos, la industria farmacéutica se enfrenta habitualmente a problemas asociados a la baja solubilidad de los nuevos compuestos desarrollados. Para poner este problema en perspectiva, cabe destacar que el 40% de las nuevas sustancias desarrolladas por la industria farmacéutica son prácticamente insolubles en agua. Esto limita enormemente ciertos aspectos como la biodisponibilidad de los fármacos y, en consecuencia, su eficacia. Existen diversas estrategias para solventar este problema entre las que figuran la derivatización y el encapsulamiento. En este proyecto se investigarán estas estrategias para aumentar la solubilidad en medio acuoso de fármacos modelo [como la (s)-(+)-camptotecina]. El trabajo consistirá en la síntesis de sondas fluorescentes y en el uso de copolímeros de bloque anfífilo para la formación de nanotransportadores con capacidad para encapsular moléculas lipófilas de bajo peso molecular, con o sin ningún tipo de derivatización. Se explorará así la formación de enlaces no covalentes o covalentes dinámicos entre el polímero y la sustancia encapsulada, que puede resultar beneficiosa en cuanto a la estabilidad y capacidad de carga del nanotransportador.

Con este trabajo el estudiante aprenderá a desenvolverse en un laboratorio de síntesis orgánica, con tareas dirigidas a la síntesis de Intermedios y/o monómeros orgánicos, así como a la optimización de reacciones de polimerización y de funcionalización de macromoléculas. Trabajará las técnicas de cromatografía y caracterización estructural (RMN, IR, MS) para purificar e Identificar compuestos de bajo peso molecular. Trabajará y adquirirá conocimientos en Química Macromolecular y Supramolecular, específicamente en la preparación y la caracterización de polímeros, y en técnicas de análisis térmico (DSC y TGA). Dado el carácter multidisciplinar del trabajo abarcando desde la preparación de materiales al procesado y caracterización se hace necesaria la codirección para cubrir mejor estos aspectos.

En Zaragoza, 22 de septiembre de 20 17

(La propuesta deberá estar firmada por los directores y el ponente, en su caso, y contar con el VºBº del Departamento responsable)



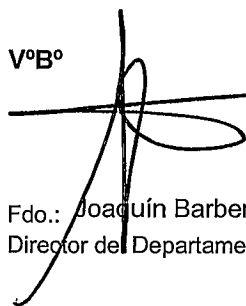
Fdo.: Luis Oriol Langa
Director



Fdo.: Jesús del Barrio Lasheras
Director

Fdo.:
Ponente

VºBº



Fdo.: Joaquín Barberá Gracia
Director del Departamento de Química Orgánica



Departamento de
Química Orgánica
Universidad Zaragoza

Este documento debe ser entregado por el director en la Secretaría del Departamento dentro del plazo establecido, para su remisión a la Comisión de Garantía de la Calidad del Máster

ANEXO I

PROPUESTA DE TRABAJO FIN DE MÁSTER EN QUÍMICA MOLECULAR Y CATÁLISIS HOMOGÉNEA

CURSO ACADÉMICO: 2017-2018

DEPARTAMENTO RESPONSABLE: Química Orgánica

TÍTULO DEL TFM:

Síntesis de beta-cisteínas modificadas a partir de oxazolonas y tiazolonas

	Apellidos, Nombre	Centro y categoría	Doctor (si/no)	Email	Teléfono
Director	Cativiela Marin, Carlos	ISQCH (Univ. Zaragoza), Catedrático	si	cativiela@unizar.es	841210
Director	Urriolabeitia Arrondo, Esteban	ISQCH (CSIC) Investigador Científico	si	esteban@unizar.es	842302
Ponente					

Lugar previsto para la realización del TFM:

Facultad de Ciencias:

Otro:

Breve descripción de los Objetivos y del Plan de trabajo a desarrollar por el alumno:

(Comente las tareas a realizar, técnicas a utilizar, etc. **Máximo 250 palabras**). Además, de acuerdo con lo expuesto en las directrices propias de su Máster, si es el caso:

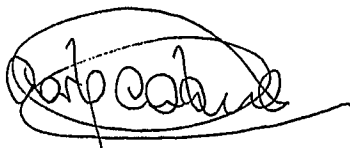
- Justifique la necesidad de un segundo Director
- Si de forma extraordinaria el TFM está afectado por un acuerdo de confidencialidad, justifique las razones y aporte la documentación requerida

El objetivo del presente trabajo de Fin de Master es la síntesis de cisteínas que presentan un sustituyente en la posición beta. El sustituyente puede ser un grupo alquilo, arilo, vinilo, etc, buscando la mayor generalidad del método. El método como tal implica la síntesis de diversos precursores: se comenzará con 5(4H)-oxazolonas, que se prepararán por la síntesis de Erlenmeyer-Ploch, y se transformarán en tiazolonas por reacción con diversos derivados de azufre. La reactividad de estas tiazolonas nos llevará a las correspondientes tiazolinas, con sustituyentes en las posiciones 2 y 4. Estas tiazolinas se modificarán y transformarán posteriormente mediante métodos orgánicos clásicos y también mediante organometálicos, y constituyen la última etapa previa a la síntesis de las beta-cisteínas. Por tanto, el trabajo involucra una amplia variedad de especies con muy diferente reactividad, se ve un completo abanico de reacciones orgánicas y organometálicas, lo que resulta altamente formativo.

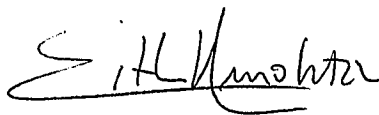
Todos los compuestos preparados se caracterizarán mediante los métodos habituales en química orgánica y organometálica: espectros de RMN, IR, Masas de alta resolución, análisis elemental, entre otros. En los casos en que sea posible se empleará la difracción de rayos-X sobre monocristal, y también es previsible estudiar determinados sistemas por métodos DFT. Todo este conjunto de técnicas estructurales, sumado al bagaje sintético que se adquiere, proporciona una sólida formación en química orgánica, organometálica y en determinación estructural, materias troncales de este Máster en Química Molecular y Catálisis Homogénea, por lo que la adecuación al mismo es completa. Además, como todo trabajo de Investigación original, precisa de su correcta contextualización, por lo que las labores de búsqueda bibliográfica son obligadas. La labor formativa del trabajo se completa con la escritura de la memoria según las pautas proporcionadas, y la defensa del mismo.

En Zaragoza, 14 de Julio de 20 17

(La propuesta deberá estar firmada por los directores y el ponente, en su caso, y contar con el VºBº del Departamento responsable)



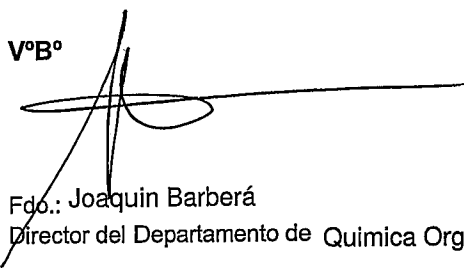
Fdo.: Carlos Cativiela
Director



Fdo.: Esteban Urriolabeitia
Director

Fdo.:
Ponente

VºBº



Fdo.: Joaquin Barberá
Director del Departamento de Química Orgánica

Este documento debe ser entregado por el director en la Secretaría del Departamento dentro del plazo establecido, para su remisión a la Comisión de Garantía de la Calidad del Máster

ANEXO I

PROPUESTA DE TRABAJO FIN DE MÁSTER EN QUÍMICA MOLECULAR Y CATÁLISIS HOMOGÉNEA

CURSO ACADÉMICO: 2017/2018

DEPARTAMENTO RESPONSABLE: QUÍMICA ORGÁNICA

TÍTULO DEL TFM:

Organocatálisis enantioselectiva con tioureas quirales

	Apellidos, Nombre	Centro y categoría	Doctor (si/no)	Email	Teléfono
Director	TEJERO LOPEZ, Tomás	Facultad de Ciencias. Catedrático	SI	ttejero@unizar.es	976762075
Director					
Ponente					

Lugar previsto para la realización del TFM:

Facultad de Ciencias:

Otro:

Breve descripción de los Objetivos y del Plan de trabajo a desarrollar por el alumno:

(Comente las tareas a realizar, técnicas a utilizar, etc. **Máximo 250 palabras**). Además, de acuerdo con lo expuesto en las directrices propias de su Máster, si es el caso:

- Justifique la necesidad de un segundo Director
- Si de forma extraordinaria el TFM está afectado por un acuerdo de confidencialidad, justifique las razones y aporte la documentación requerida

La organocatálisis o catálisis orgánica permite preparar una gran cantidad de compuestos enantioméricamente puros utilizando pequeñas moléculas orgánicas como catalizadores, de forma complementaria a como lo hace la catálisis metálica clásica. Entre las moléculas orgánicas que pueden actuar como catalizadores, las tioureas ocupan un lugar privilegiado por su capacidad de formar puentes de hidrógeno con una gran variedad de grupos funcionales activándolos frente a un gran número de reacciones. En este TFM el estudiante investigará la aplicación de determinadas tioureas enantioméricamente puras que, bajo ciertas condiciones, son capaces de promover la formación de redes de puentes de hidrógeno responsables de la activación y catálisis enantioselectivas de una gran variedad de reacciones orgánicas. Para dicho estudio se elegirá una reacción modelo que permitirá determinar las mejores condiciones para lograr una elevada pureza enantiomérica de los productos preparados. El Plan de trabajo incluirá la elección y preparación de sustratos de partida adecuados, optimización de condiciones y alcance de la metodología a diversos tipos de compuestos.

Las principales técnicas a utilizar serán todas aquellas relacionadas con la síntesis orgánica y la catálisis asimétrica, incluyendo manipulación de reactivos químicos sensibles a la humedad, establecimiento de condiciones de reacción particulares y aislamiento, purificación e identificación de compuestos enantioméricamente puros y/o enriquecidos. Entre estas últimas el estudiante adquirirá competencias en todo tipo de purificaciones cromatográficas incluyendo MPLC y HPLC con especial énfasis en HPLC quiral así como en el empleo e interpretación de técnicas de RMN. También se incluirán otras técnicas necesarias para el estudio cinético de las reacciones como IR, UV, etc.

En Zaragoza, 26 de Junio de 20 17

(La propuesta deberá estar firmada por los directores y el ponente, en su caso, y contar con el VºBº del Departamento responsable)



Fdo.: Tomas TEJERO
Director

Fdo.:
Director

Fdo.:
Ponente

VºBº



Departamento de
Química Orgánica
Universidad Zaragoza

Fdo.: Joaquín Barberá
Director del Departamento de Química Orgánica

TITULO: Organocatálisis enantioselectiva con tioureas quirales

DIRECTOR: Tomas TEJERO

RESUMEN:

La organocatálisis o catálisis orgánica permite preparar una gran cantidad de compuestos enantioméricamente puros utilizando pequeñas moléculas orgánicas como catalizadores, de forma complementaria a como lo hace la catálisis metálica clásica. Entre las moléculas orgánicas que pueden actuar como catalizadores, las tioureas ocupan un lugar privilegiado por su capacidad de formar puentes de hidrógeno con una gran variedad de grupos funcionales activándolos frente a un gran número de reacciones. En este TFM el estudiante investigará la aplicación de determinadas tioureas enantioméricamente puras que, bajo ciertas condiciones, son capaces de promover la formación de redes de puentes de hidrógeno responsables de la activación y catálisis enantioselectivas de un amplio conjunto de reacciones orgánicas. Para dicho estudio se elegirá una reacción modelo que permitirá determinar las mejores condiciones para lograr una elevada pureza enantiomérica de los productos preparados. El Plan de trabajo incluirá la elección y preparación de sustratos de partida adecuados, optimización de condiciones y alcance de la metodología a diversos tipos de compuestos.

Este documento debe ser entregado por el director en la Secretaría del Departamento dentro del plazo establecido, para su remisión a la Comisión de Garantía de la Calidad del Máster

ANEXO I

PROPUESTA DE TRABAJO FIN DE MÁSTER EN QUÍMICA MOLECULAR Y CATÁLISIS HOMOGÉNEA

CURSO ACADÉMICO: 2017/2018

DEPARTAMENTO RESPONSABLE: QUÍMICA ORGÁNICA

TÍTULO DEL TFM:

Estudio computacional de la sincronización de reacciones orgánicas mediante un caso de estudio

	Apellidos, Nombre	Centro y categoría	Doctor (si/no)	Email	Teléfono
Director	MERINO FILELLA; Pedro	Facultad de Ciencias. Catedrático	SI	pmerino@unizar.es	876553783
Director					
Ponente					

Lugar previsto para la realización del TFM:

Facultad de Ciencias:



Otro:

Breve descripción de los Objetivos y del Plan de trabajo a desarrollar por el alumno:

(Comente las tareas a realizar, técnicas a utilizar, etc. **Máximo 250 palabras**). Además, de acuerdo con lo expuesto en las directrices propias de su Máster, si es el caso:

- Justifique la necesidad de un segundo Director
- Si de forma extraordinaria el TFM está afectado por un acuerdo de confidencialidad, justifique las razones y aporte la documentación requerida

La sincronización de una reacción orgánica es un aspecto crucial cuando se considera su mecanismo ya que puede tener implicaciones directas en la estereoselectividad de la misma. Mediante este TFM el alumno adquirirá las habilidades necesarias para estudiar en detalle el mecanismo de una reacción orgánica a través de herramientas computacionales. Se elegirá un caso de estudio, es decir una determinada reacción, y se llevará a cabo un análisis en profundidad del transcurso de la reacción incluyendo cálculo de puntos estacionarios (mínimos y estados de transición) y determinación de coordenadas de reacción. Las tareas del alumno incluirán desarrollar dichos cálculos y valorar los distintos mecanismos que puedan tener lugar, concertados o por pasos. Para el análisis de los resultados obtenidos se introducirá al alumno en el empleo de técnicas computacionales que permitan un estudio topológico de la reacción elegida. A través de dicho estudio, el alumno podrá evaluar tanto la evolución de la densidad electrónica a lo largo de la reacción elegida como la influencia de interacciones no-covalentes.

Las principales técnicas a utilizar serán herramientas informáticas ya sean generales como lenguaje Linux y programación de scripts o aplicadas a la Química como diverso software especializado en cálculo de química cuántica (QM) y visualización de resultados, para los que se emplearan diferentes programas en función del tipo de estudio computacional. En este sentido, se espera que el alumno adquiera las habilidades necesarias para poder abordar por si sólo un estudio computacional riguroso de cualquier reacción orgánica.

En Zaragoza, 26 de Junio de 20 17

(La propuesta deberá estar firmada por los directores y el ponente, en su caso, y contar con el VºBº del Departamento responsable)



Fdo.: Pedro MERINO
Director

Fdo.:
Director

Fdo.:
Ponente

VºBº



Fdo.: Joaquín Barberá
Director del Departamento de Química Orgánica

6010004
1542

Departamento de
Química Orgánica
Universidad Zaragoza

TITULO: Estudio computacional de la sincronicidad de reacciones orgánicas mediante un caso de estudio

DIRECTOR: Pedro MERINO

RESUMEN:

La sincronicidad de una reacción orgánica es un aspecto crucial cuando se considera su mecanismo ya que puede tener implicaciones directas en la estereoselectividad de la misma. Mediante este TFM el alumno adquirirá las habilidades necesarias para estudiar en detalle el mecanismo de una reacción orgánica a través de herramientas computacionales. Se elegirá un caso de estudio, es decir una determinada reacción, y se llevará a cabo un análisis en profundidad del transcurso de la reacción incluyendo cálculo de puntos estacionarios (mínimos y estados de transición) y determinación de coordenadas de reacción. Las tareas del alumno incluirán desarrollar dichos cálculos y valorar los distintos mecanismos que puedan tener lugar, concertados o por pasos. Para el análisis de los resultados obtenidos se introducirá al alumno en el empleo de técnicas computacionales que permitan un estudio topológico de la reacción elegida. A través de dicho estudio, el alumno podrá evaluar tanto la evolución de la densidad electrónica a lo largo de la reacción elegida como la influencia de interacciones no-covalentes.

Este documento debe ser entregado por el director en la Secretaría del Departamento dentro del plazo establecido, para su remisión a la Comisión de Garantía de la Calidad del Máster

ANEXO I

PROPUESTA DE TRABAJO FIN DE MÁSTER EN QUÍMICA MOLECULAR Y CATÁLISIS HOMOGÉNEA

CURSO ACADÉMICO: 2017/2018

DEPARTAMENTO RESPONSABLE: QUÍMICA ORGÁNICA

TÍTULO DEL TFM:

Síntesis de derivados y análogos de UDP-GalNAc

	Apellidos, Nombre	Centro y categoría	Doctor (si/no)	Email	Teléfono
Director	MERINO FILELLA, Pedro	Facultad de Ciencias. Catedrático.	SI	pmerino@unizar.es	976553783
Director	TEJERO LOPEZ, Tomás	Facultad de Ciencias. Catedrático.		ttejero@unizar.es	976762075
Ponente					

Lugar previsto para la realización del TFM:

Facultad de Ciencias:



Otro:

Breve descripción de los Objetivos y del Plan de trabajo a desarrollar por el alumno:

(Comente las tareas a realizar, técnicas a utilizar, etc. **Máximo 250 palabras**). Además, de acuerdo con lo expuesto en las directrices propias de su Máster, si es el caso:

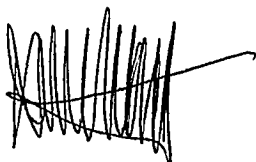
- Justifique la necesidad de un segundo Director
- Si de forma extraordinaria el TFM está afectado por un acuerdo de confidencialidad, justifique las razones y aporte la documentación requerida

La glicosilación de proteínas mediante enzimas específicos (glicosiltransferasas, GTs) es, con diferencia, la modificación post-traslacional más importante que tiene lugar en los seres vivos. La reacción tiene lugar a través de la activación del carbohidrato con una unidad nucleotídica que se reconoce por la correspondiente glicosiltransferasa. Entre este tipo de enzimas la familia GalNAc-Tx compuesta de hasta 20 enzimas con especificidades diferentes y que utiliza UDP-GalNAc como sustrato, ha despertado un gran interés por su implicación en multitud de procesos biológicos y las correspondientes disfunciones y enfermedades asociadas (cáncer, neurodegenerativas, autoinmunes, etc.). Por ello la inhibición y estudio del mecanismo de acción de estas enzimas resulta de gran interés. Mediante la preparación de análogos estructurales de dicho sustrato, el estudiante será capaz de estudiar y valorar, utilizando medios espectroscópicos computacionales y ensayos biológicos (éstos últimos a través de colaboraciones), la afinidad de los productos preparados por la enzima GalNAc-T2 de la que se dispone en el grupo de investigación donde se desarrollará el trabajo.

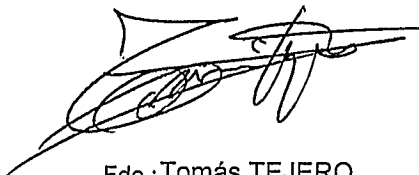
Las principales técnicas a utilizar incluirán todas aquellas relacionadas con la síntesis orgánica incluyendo manipulación de reactivos químicos sensibles a la humedad, establecimiento de condiciones de reacción particulares y aislamiento, purificación e identificación de compuestos enantioméricamente puros, con especial énfasis en compuestos biológicamente relevantes que contienen unidades de carbohidratos y grupos fosfato. El estudiante adquirirá competencias en todo tipo de purificaciones cromatográficas incluyendo, además de la cromatografía clásica, las de intercambio iónico y exclusión en sus modalidades tanto de tipo MPLC como HPLC así como en el empleo e interpretación de técnicas convencionales y avanzadas de RMN. También se incluirán otras técnicas necesarias para el estudio de productos de interés biológico como diálisis o liofilización. El carácter multidisciplinar del trabajo que implica métodos sintéticos, computacionales, espectroscópicos y colaboraciones hace indispensable dos directores que aporten la experiencia necesaria en todos los aspectos mencionados.

En Zaragoza, 26 de Junio de 20 17

(La propuesta deberá estar firmada por los directores y el ponente, en su caso, y contar con el VºBº del Departamento responsable)



Fdo.: Pedro Merino
Director



Fdo.: Tomás TEJERO
Director

Fdo.:
Ponente

VºBº



Departamento de
Química Orgánica
Universidad Zaragoza

Fdo. Joaquín Barberá
Director del Departamento de Química Orgánica

TITULO: Síntesis de derivados y análogos de UDP-GalNAc

DIRECTOR: Pedro Merino & Tomás Tejero

RESUMEN: La glicosilación de proteínas mediante enzimas específicos (glicosiltransferasas, GTs) es, con diferencia, la modificación post-traslacional más importante que tiene lugar en los seres vivos. La reacción tiene lugar a través de la activación del carbohidrato con una unidad nucleotídica que se reconoce por la correspondiente glicosiltransferasa. Entre este tipo de enzimas la familia GalNAc-Tx compuesta de hasta 20 enzimas con especificidades diferentes y que utiliza UDP-GalNAc como sustrato, ha despertado un gran interés por su implicación en multitud de procesos biológicos y las correspondientes disfunciones y enfermedades asociadas (cáncer, neurodegenerativas, autoinmunes, etc.). Por ello la inhibición y estudio del mecanismo de acción de estas enzimas resulta de gran interés. Mediante la preparación de análogos estructurales de dicho sustrato, el estudiante será capaz de estudiar y valorar, utilizando medios espectroscópicos computacionales y ensayos biológicos (éstos últimos a través de colaboraciones), la afinidad de los productos preparados por la enzima GalNAc-T2 de la que se dispone en el grupo de investigación donde se desarrollará el trabajo.



Este documento debe ser entregado por el director en la Secretaría del Departamento dentro del plazo establecido, para su remisión a la Comisión de Garantía de la Calidad del Máster

ANEXO I

PROPUESTA DE TRABAJO FIN DE MÁSTER EN QUÍMICA MOLECULAR Y CATÁLISIS HOMOGÉNEA

CURSO ACADÉMICO: 2017/2018

DEPARTAMENTO RESPONSABLE: QUÍMICA ORGÁNICA

TÍTULO DEL TFM:

Síntesis de compuestos fosforilados de interés biológico

	Apellidos, Nombre	Centro y categoría	Doctor (si/no)	Email	Teléfono
Director	DEL SO HERNANDEZ, Ignacio	CEQMA. Técnico Superior CSIC	SI	idelso@unizar.es	876553518
Director					
Ponente	MERINO FILELLA, Pedro	Catedrático	SI	pmerino@unizar.es	876553783

Lugar previsto para la realización del TFM:

Facultad de Ciencias:



Otro:

Breve descripción de los Objetivos y del Plan de trabajo a desarrollar por el alumno:

(Comente las tareas a realizar, técnicas a utilizar, etc. **Máximo 250 palabras**). Además, de acuerdo con lo expuesto en las directrices propias de su Máster, si es el caso:

- Justifique la necesidad de un segundo Director
- Si de forma extraordinaria el TFM está afectado por un acuerdo de confidencialidad, justifique las razones y aporte la documentación requerida

La preparación de sustratos fosforilados resulta crucial en la búsqueda de ligandos y/o inhibidores enzimáticos ya que gran cantidad de compuestos que puedan actuar como tales necesitan de un nucleótido que facilite el reconocimiento enzimático como es el caso de las glicosiltransferasas. Asimismo, mediante el empleo de sustratos fosforilados análogos de los sustratos naturales es posible abordar el estudio de mecanismos de reacción enzimáticos de dichos enzimas. En este TFM, el estudiante abordará el estudio de diversas metodologías de acoplamiento de sustratos fosforilados a compuestos orgánicos que puedan servir como miméticos de sustratos enzimáticos naturales. El estudio incluirá la preparación de moléculas sencillas que puedan ser utilizadas en la elucidación estructural o mediante técnicas espectroscópicas del mecanismo de determinadas reacciones catalizadas por glicosiltransferasas.

Las principales técnicas a utilizar incluirán todas aquellas relacionadas con la síntesis orgánica incluyendo manipulación de reactivos químicos sensibles a la humedad, establecimiento de condiciones de reacción particulares y aislamiento, purificación e identificación de compuestos enantioméricamente puros. Entre estas últimas el estudiante adquirirá competencias en todo tipo de purificaciones cromatográficas incluyendo, además de la cromatografía clásica, las de intercambio iónico y exclusión en sus modalidades tanto de tipo MPLC como HPLC con especial énfasis en HPLC en fase reversa y semipreparativa, así como en el empleo e interpretación de técnicas convencionales y avanzadas de RMN. También se incluirán otras técnicas necesarias para el estudio de productos de interés biológico como diálisis o liofilización.

En Zaragoza, 26 de Junio de 20 17

(La propuesta deberá estar firmada por los directores y el ponente, en su caso, y contar con el VºBº del Departamento responsable)




Fdo.: Ignacio DELSO
Director

Fdo.:
Director



Fdo.: Pedro MERINO
Ponente

VºBº



Fdo.: Joaquín Barberá
Director del Departamento de Química Orgánica



Departamento de
Química Orgánica
Universidad Zaragoza