

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: 2018-2019

DEPARTAMENTO RESPONSABLE: Química Orgánica

TÍTULO DEL TFM: Desarrollo de Materiales Orgánicos Nanoestructurados mediante Química Covalente y Química Supramolecular.
Development of Nanostructured Organic Materials by Covalent Chemistry and Supramolecular

	Apellidos, Nombre	Centro y relación contractual con el centro *	Doctor (sí/no)	Email	Teléfono
Director 1	Ros Latienda, M Blanca	Facultad de Ciencias. CU	Sí	bros@unizar.es	842277
Director 2					
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: Preparación y caracterización de materiales supramoleculares nanoestructurados a partir de anfífilos de tipo bent-core, mediante procesos de autoensamblaje.

Motivación: Controlar el autoensamblaje de moléculas pequeñas con el fin de generar materiales funcionales utilizando la química supramolecular es un campo de investigación dinámico y desafiante, ya que los materiales blandos (soft-materials) y los nanoobjetos con diversas morfologías así obtenidos deben sus propiedades físicas y funcionales, bien a su forma o a su estructura, y con ello, sus aplicaciones en áreas de vanguardia que van desde la nanotecnología hasta la biotecnología [1].

Sin embargo, muchos de estos sistemas nanoestructurados aún son difíciles de preparar y de controlar su organización, especialmente en agua, lo que supondría avances en el ámbito de la biológica, medicina y la ciencia de materiales. A pesar de los destacados resultados obtenidos hasta la fecha, hay pocos estudios sobre el autoensamblaje de moléculas de geometría curvada (bent-core) en presencia de disolventes, [2] aunque sus propiedades como cristales líquidos por acción de la temperatura han sido mucho más exploradas y con resultados muy novedosos y distintivos.[3] En este proyecto de investigación se plantea realizar avances pioneros en el control del empaquetamiento molecular de anfifilos de tipo "bent-core" con el fin de generar materiales nanoestructurados con respuesta a estímulos externos, tanto como en su forma neta, como y en presencia de disolventes, materiales todos ellos con muchas posibilidades a nivel tecnológico.

Actividades: La investigación implicará la síntesis covalente multietapa de distintas moléculas anfifílicas de tipo "bent-core" y de sus diferentes organizaciones supramoleculares - cristales líquidos, geles y nanoobjetos de tipo fibrilar o nanotubos. La caracterización completa de las estructuras moleculares y supramoleculares se llevará a cabo mediante el uso de técnicas que van desde la espectroscopia (UV-vis, FTIR, RMN, EM, DC), calorimetría (TGA y DSC), microscopías (POM, SEM y TEM) hasta la difracción de rayos X.

[1] a) S. I. Stupp et al., Chem. Mater. 2014, 26, 507. b) S. Sevin et al., Chem. Soc. Rev., 2018, 47,3788. c) T. Kato et al., Angew.Chem. Int. Ed. 2018, 57, 4355. d) M. Martínez-Abadía et al., Adv. Mater. 2018, 30, 1704161. [2] M. B. Ros et al. Angew. Chem. Int. Ed. 2014, 53, 13449. [3] a) R. A. Reddy, C. Tschierske, J. Mater. Chem. 2006, 16, 907. b) J. Etxebarria, M. B. Ros, J. Mater. Chem., 2008,18, 2919.

En Zaragoza, 4 de SEPTIEMBRE de 2018

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

El personal investigador contratado por obra y servicio, como norma general, no puede realizar las tareas de dirección o codirección de Trabajos Fin de Master. La única excepción es si el objeto de dicho trabajo está directa e inmediatamente relacionado con la obra o servicio para la que ha sido contratado. Para esta excepcionalidad es imprescindible que el investigador principal del proyecto por el que ha sido contratado emita un informe razonado en tal sentido, que se adjuntará al Anexo I de propuesta de TFM.

Fdo.: M. Blanca Ros
Director

Fdo.:
Director

Fdo.:
Ponente

Vº Bº
El Director del Departamento de
Química Orgánica

Fdo.:
Director del Departamento de
Fdo.: Joaquín M. Barba García

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 QUIMICA MOLECULAR Y CATÁLISIS HOMOGÉNEA

CURSO ACADÉMICO: 2018/2019

DEPARTAMENTO RESPONSABLE: QUIMICA ORGÁNICA-INGENIERÍA QUÍMICA Y TECNOLOGÍA

TÍTULO DEL TFM: Desarrollo de moléculas orgánicas y nanopartículas inorgánicas para co-sensitización en celdas solares de tipo Grätzel.

	Apellidos, Nombre	Centro y relación contractual con el centro *	Doctor (sí/no)	Email	Teléfono
Director 1	M ^a Jesús BLESA	EINA / Prof. Titular	SI	mjblesa@unizar.es	876 553507
Director 2	María BERNECHEA	INA /Investigadora ARAID	SI	mbernechea@unizar.e	876 555282
Ponente					

Lugar previsto para la realización del TFM:

Facultad de Ciencias:

Otro: INA

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

Las celdas solares de tipo Grätzel consisten en un electrodo semiconductor (normalmente TiO₂) y un electrodo metálico conectado internamente por un electrolito con propiedades redox y por un circuito externo, que es el que proporciona la energía aprovechable.

Como el TiO₂ solo es capaz de absorber luz ultravioleta, éste se decora con moléculas capaces de absorber más longitudes de onda del espectro solar. Tradicionalmente se han empleado complejos de rutenio, pero se están buscando alternativas más económicas. Estudios realizados en nuestro grupo, empleando moléculas derivadas de la anilina (400-475 nm), han dado lugar a eficiencias de hasta el 6,5 %.

En este trabajo se explorará la combinación de estas moléculas con nanocristales inorgánicos, compuestos de elementos abundantes y no-tóxicos capaces de absorber en el infrarrojo (desde 1000 nm). Se pretende estudiar si la combinación sinérgica de materiales orgánicos e inorgánicos, absorbiendo en distintas zonas del espectro solar, permite mejorar las eficiencias.

Para ello:

- * Se realizará una revisión bibliográfica para estimar el potencial de esta idea.
- * Se sintetizarán y caracterizarán moléculas orgánicas y nanocristales.
- * Se fabricarán y caracterizarán celdas solares empleando los materiales sintetizados tanto individualmente como en combinación.
- * Se realizará un análisis de los resultados y se propondrán estrategias de mejora.

Este trabajo combina el uso de diferentes materiales, lo que conlleva el uso de diferentes tipos de síntesis (síntesis orgánica y de nanomateriales) y técnicas de caracterización (RMN, FTIR, MS, TEM, XRD, etc.) por lo que estará dirigido por dos tutoras con experiencias complementarias.

En Zaragoza, 27 de Junio de 2018

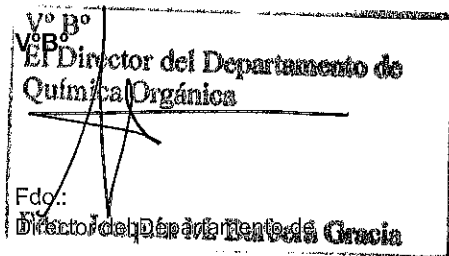
(La propuesta deberá estar firmada por los directores y el ponente, en su caso, y contar con el VºBº del Departamento responsable)

El personal investigador contratado por obra y servicio, como norma general, no puede realizar las tareas de dirección o codirección de Trabajos Fin de Master. La única excepción es si el objeto de dicho trabajo está directa e inmediatamente relacionado con la obra o servicio para la que ha sido contratado. Para esta excepcionalidad es imprescindible que el investigador principal del proyecto por el que ha sido contratado emita un informe razonado en tal sentido, que se adjuntará al Anexo I de propuesta de TFM.

Fdo.: M.ª Jesús Blesa
Director

Fdo.: MARÍA BERNECHEA
Director

Fdo.:
Ponente



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: 2018-19

DEPARTAMENTO RESPONSABLE: Química Orgánica

TÍTULO DEL TFM: Síntesis y caracterización de nuevas moléculas orgánicas con aplicaciones en dispositivos fotovoltaicos de última generación

	Apellidos, Nombre	Centro y relación contractual con el centro *	Doctor (sí/no)	Email	Teléfono
Director 1	Franco Ontaneda, Santiago	Facultad de Ciencias / Profesor Titular de Universidad	SI	sfranco@unizar.es	976 762283
Director 2					
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

Desde hace aproximadamente veinte años se viene desarrollando un enorme esfuerzo en la búsqueda de alternativas a los dispositivos fotovoltaicos convencionales basados en silicio o semiconductores inorgánicos. En este sentido las celdas solares sensibilizadas por un colorante (Dye Sensitized Solar Cells o DSSCs) suscitaron desde un principio un gran interés debido a las ventajas que presentaban con respecto a otros sistemas: bajos costes de fabricación, facilidad de procesado, posibilidad de emplear sustratos flexibles o funcionamiento con luz artificial. Se trata de un tipo de celdas inspirados en uno de los procesos más importantes de la naturaleza: la fotosíntesis.

El componente fundamental en una DSSC es un colorante fotosensible, capaz de excitarse cuando es irradiado por una fuente de luz en un intervalo determinado de longitudes de onda. Se buscan moléculas que absorban en la mayor parte del espectro visible, incluso en el infrarrojo cercano, para aprovechar mejor la radiación solar.

Se propone un proyecto en Síntesis Orgánica con varios objetivos:

- 1.- Preparación y caracterización completa de nuevas moléculas orgánicas que puedan incorporarse a celdas de tipo DSSC. Las moléculas tendrán una estructura de tipo Dador-pi-Aceptor, debido a los buenos resultados descritos con este tipo de compuestos.
- 2.- Construcción y caracterización de los dispositivos fotovoltaicos. Se estudiará su comportamiento en interiores con luz artificial: leds o fluorescentes.

Todos los objetivos planteados se llevarán a cabo en los laboratorios que el Grupo de Materiales Moleculares Electro y Fotoactivos posee en el Departamento de Química Orgánica de la Universidad de Zaragoza.

En Zaragoza, 9 de julio de 2018

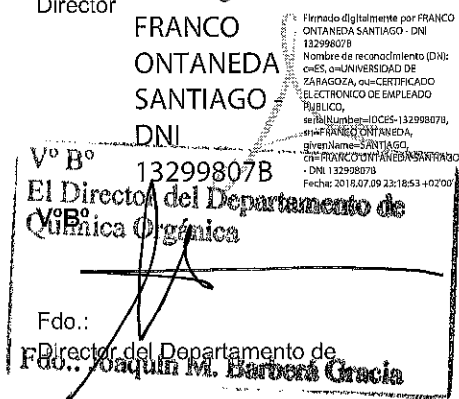
(La propuesta deberá estar firmada por los directores y el ponente, en su caso, y contar con el VºBº del Departamento responsable)

El personal investigador contratado por obra y servicio, como norma general, no puede realizar las tareas de dirección o codirección de Trabajos Fin de Master. La única excepción es si el objeto de dicho trabajo está directa e inmediatamente relacionado con la obra o servicio para la que ha sido contratado. Para esta excepcionalidad es imprescindible que el investigador principal del proyecto por el que ha sido contratado emita un informe razonado en tal sentido, que se adjuntará al Anexo I de propuesta de TFM.

Fdo.: Santiago Franco Ontaneda
Director

Fdo.:
Director

Fdo.:
Ponente



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 mecanismos de reacciones orgánicas

	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

El mecanismo de una reacción orgánica es un aspecto crucial 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 llevara 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, 29 de Junio de 20 18

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

MERINO
FILELLA
PEDRO JOSE -
17871707V

Firmado digitalmente
por MERINO FILELLA
PEDRO JOSE -
17871707V
Fecha: 2018.06.30
14:15:22 +02'00'

Fdo.: Pedro MERINO
Director

Fdo.:
Director

Fdo.:
Ponente

Vº Bº
El Director del Departamento de
Química Orgánica

Fdo. Joaquín M. Barberá Orcaja
Fdo.: Joaquín 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: 2018/2019

DEPARTAMENTO RESPONSABLE: QUÍMICA ORGÁNICA

TÍTULO DEL TFM:

Diseño racional de ligandos enzimáticos

	Apellidos, Nombre	Centro y categoría	Doctor (sí/no)	Email	Teléfono
Director	MERINO FILELLA, Pedro	Facultad de Ciencias. Catedrático.	SI	pmerino@unizar.es	976553783
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 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 diversas enzimas 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, 29 de Junio de 2018

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

MERINO
FILELLA
PEDRO JOSE
17871707V

Firmado digitalmente
por MERINO FILELLA
PEDRO JOSE -
17871707V
Fecha: 2018.06.30
14:15:57 +02'00'

Fdo.: Pedro Merino
Director

Fdo.:
Director

Fdo.:
Ponente

Vº Bº
El Director del Departamento de
Química Orgánica

Fdo.: Joaquín Barberá Gracia
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: 2018/19

DEPARTAMENTO RESPONSABLE: QUÍMICA ORGÁNICA

TÍTULO DEL TFM: Copolímeros bloque anfífilos supramoleculares para la preparación de nanotransportadores en agua

	Apellidos, Nombre	Centro y relación contractual con el centro *	Doctor (sí/no)	Email	Teléfono
Director 1	ORIO L LANGA, LUIS	FACULTAD DE CIENCIAS / CU	SI	loriol@unizar.es	843785
Director 2	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 con unidades complementarias capaces de reconocerse mutuamente por enlace 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.

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

Trabjará 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). 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, 26 de junio de 2018

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

El personal investigador contratado por obra y servicio, como norma general, no puede realizar las tareas de dirección o codirección de Trabajos Fin de Master. La única excepción es si el objeto de dicho trabajo está directa e inmediatamente relacionado con la obra o servicio para la que ha sido contratado. Para esta excepcionalidad es imprescindible que el investigador principal del proyecto por el que ha sido contratado emita un informe razonado en tal sentido, que se adjuntará al Anexo I de propuesta de TFM.

Firmado digitalmente por ORIOL LANGA LUIS
TEODORO - DNI 17438020H
Nombre de reconocimiento (DN): cn=ES,
o=UNIVERSIDAD DE ZARAGOZA,
ou=certificado electrónico de empleado
público, postalNumber=17438020H, sn=ORIOL
LANGA, givenName=LUIS TEODORO, c=ES,
cn=ORIOL LANGA LUIS TEODORO - DNI
17438020H
Fecha: 2018.06.26 11:16:00 +02'00'

Fdo.: Luis Oriol

PIÑOL
LACAMBRA
MILAGROS -
DNI 25132078R

Fdo.: Milagros Piñol
Director

Fdo.:
Ponente

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

Fdo.:
Director del Departamento de