



UNIVERSIDAD  
DE GRANADA

## PROPUESTA DE TRABAJO FIN DE GRADO

GRADO EN QUÍMICA

CURSO 2023/2024



Facultad de Ciencias

### PROPUESTA ASOCIADA A PRÁCTICAS EXTERNAS

#### DATOS BÁSICOS DEL TFG

TÍTULO TFG	Diseño de cocristales fármaco-fármaco con propiedades físico-químicas mejoradas		
CÓDIGO TFG <sup>(1)</sup>	EMPRESA-01	TIPOLOGÍA <sup>(2)</sup>	A2

<sup>(1)</sup> A rellenar por la dirección del dpto que vendrá dado como: código del dpto-Nº de orden (p.e.: QA-01)

<sup>(2)</sup> Al final del documento se encuentran las diferentes tipologías

#### DATOS DE LA ENTIDAD (donde se va a realizar el TFG)

CENTRO (Departamento, institución o empresa)	Instituto Andaluz de Ciencias de la Tierra, CSIC		
DIRECCIÓN POSTAL <sup>(3)</sup>	Avenida de las Palmeras 4		
LOCALIDAD <sup>(3)</sup>	Armillá	C.P. <sup>(3)</sup>	18100

<sup>(3)</sup> A rellenar en el caso de realizarse en una empresa

#### DATOS DEL TUTOR

<b>TUTOR 1 (Tutor académico en caso de realizar el TFG en una empresa o institución)</b>			
NOMBRE Y APELLIDOS	Óscar Ballesteros García		
DEPARTAMENTO	Química Analítica		
CARGO <sup>(4)</sup>	Profesor Titular de la Universidad		
TELÉFONO	958-243294	E-MAIL	oballest@ugr.es

*Rellenar en caso de haber un segundo tutor*

<b>TUTOR 2</b>			
NOMBRE Y APELLIDOS			
DEPARTAMENTO			
CARGO <sup>(4)</sup>			
TELÉFONO		E-MAIL	
<b>TUTOR DE LA EMPRESA O INSTITUCIÓN (Rellenar en caso de realizar el TFG en una empresa o institución)</b>			
NOMBRE Y APELLIDOS	Duane Choquesillo Lazarte		
TITULACIÓN	Farmacéutico / Científico Titular		
TELÉFONO	958 268908	E-MAIL	duane.choquesillo@csic.es

<sup>(4)</sup> Catedrático, Profesor Titular, Profesor Contratado Doctor,....

## MEMORIA DE LA PROPUESTA DE TFG

<p><b>Introducción.</b></p> <p>El interés en el desarrollo de nuevas formas sólidas multicomponente ha aumentado en los últimos años tanto en la industria farmacéutica, así como en la comunidad científica debido a la posibilidad de obtener materiales con mejores y nuevas propiedades. El desarrollo de nuevas estrategias de síntesis, basadas en técnicas en solución o en estado sólido, ha recibido también la atención por parte de la comunidad científica para la obtención de estos sistemas moleculares ya que permiten desarrollar estrategias de ingeniería cristalina para el diseño de nuevos materiales, ofreciendo una oportunidad para mejorar las propiedades de manufactura y/o de biodisponibilidad de fármacos. Además, representan una oportunidad de protección de la propiedad intelectual (en fármacos genéricos o aquellos cuya patente va a expirar pronto) pudiendo evitar infracciones de patentes sobre fármacos ya existentes.</p>
<p><b>Objetivos.</b></p> <p>Síntesis de cocrisales farmacéuticos duales con potencial actividad farmacológica mejorada respecto a los fármacos de partida.</p> <p>Caracterización de las nuevas formas sólidas mediante técnicas térmicas, espectrales y difractométricas.</p> <p>Evaluación de solubilidad y estabilidad de las nuevas formas sólidas obtenidas y comparación frente a los fármacos de referencia.</p>
<p><b>Resumen de los trabajos a realizar por el estudiante/Plan de trabajo.</b></p> <p>En este trabajo se plantea la síntesis de nuevos cocrisales farmacéuticos, utilizando como moléculas modelo a dos fármacos, buscando la sinergia así como la mejora de sus propiedades físicoquímicas, en particular, su solubilidad. Para ello, en una primera etapa se realizará una búsqueda de las formas sólidas reportadas en la base de datos CSD y se hará una selección de posibles moléculas co-formadoras para obtener cocrisales farmacéuticos sobre la base de criterios de complementariedad de sintones supramoleculares y cálculos termodinámicos de estabilidad. En una segunda etapa, se planteará la síntesis de estos nuevos sistemas tanto en solución como en estado sólido (LAG) seguido de la correspondiente caracterización del material obtenido usando difracción de rayos X de polvo y espectroscopias FI-IR y Raman. En aquellos casos donde exista evidencia de la formación de nuevas fases cristalinas, se procederá a la recristalización por evaporación controlada de solvente con objeto de obtener cristales de tamaño apropiado para su estudio por difracción de rayos X de monocristal. En una etapa final, se procederá a evaluar la mejora en solubilidad de las nuevas formas sólidas obtenidas, así como su estabilidad en condiciones controladas de humedad y temperatura.</p>

---

**Una vez cumplimentado deberá ser enviado junto con el resto de las propuestas del departamento en formato pdf (Word transformado en pdf, NO escaneado) al correo: [gradoquimica@ugr.es](mailto:gradoquimica@ugr.es). El nombre de cada fichero debe de coincidir con el código del TFG.**

---

### TIPOLOGÍA<sup>(2)</sup>

- A.** Trabajos de investigación con orientación básica o aplicada, cuya temática se relacione con los contenidos de la titulación, como:
- A1.** Estudio de casos, teóricos o prácticos, relacionados con la temática del Grado, a partir de material ya disponible en los Centros.
  - A2.** Trabajos experimentales, de toma de datos de campo, de laboratorio, etc.
  - A3.** Elaboración de guías prácticas relacionadas con la temática del Grado.
- B.** Trabajos científico-técnicos representativos del ejercicio profesional para el que capacita la titulación, como:
- B1.** Elaboración de un informe o un proyecto de naturaleza profesional.
  - B2.** Elaboración de un plan de empresa.
  - B3.** Simulación de encargos profesionales.
- C.** Trabajos bibliográficos (**C**)