



UNIVERSIDAD
DE GRANADA

PROPUESTA DE TRABAJO FIN DE GRADO

GRADO EN QUÍMICA

CURSO 2020/2021



Facultad de Ciencias

PROPUESTA DEL DEPARTAMENTO

DATOS BÁSICOS DEL TFG

TÍTULO TFG	Síntesis y reconocimiento de cationes de rotaxanos de diimidias aromáticas funcionalizadas con etilenglicoles		
CÓDIGO TFG ⁽¹⁾		TIPOLOGÍA ⁽²⁾	A2

⁽¹⁾ A rellenar por la dirección del dpto

OFERTADO POR	Profesor del Departamento	<input checked="" type="checkbox"/>
	Profesor del Departamento junto con Empresa o Institución	<input type="checkbox"/>

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

CENTRO (Departamento, institución o empresa)	Departamento de Química Orgánica		
DIRECCIÓN POSTAL	Facultad de Ciencias. Avda Fuente Nueva, s/n		
LOCALIDAD	Granada	C.P.	18071

DATOS DEL TUTOR

TUTOR 1 (Tutor académico en caso de realizar el TFG en una empresa o institución)			
NOMBRE Y APELLIDOS	Victor Blanco Suárez		
DEPARTAMENTO	Departamento de Química Orgánica		
CARGO ⁽³⁾	Profesor Ayudante Doctor		
TELÉFONO	958240450	E-MAIL	victorblancos@ugr.es

Rellenar en caso de haber un segundo tutor

TUTOR 2			
NOMBRE Y APELLIDOS	Sara P. Morcillo Martínez		
DEPARTAMENTO	Departamento de Química Orgánica		
CARGO ⁽³⁾	Profesora Ayudante Doctor		
TELÉFONO		E-MAIL	samorcillo@ugr.es

TUTOR DE LA EMPRESA O INSTITUCIÓN (Rellenar en caso de realizar el TFG en una empresa o institución)			
NOMBRE Y APELLIDOS			
EMPRESA			
TITULACIÓN			
TELÉFONO		E-MAIL	

⁽³⁾ Catedrático, Profesor Titular, Profesor Contratado Doctor,....

MEMORIA DE LA PROPUESTA DE TFG

Introducción.

Los [2]rotaxanos son moléculas con un componente cíclico y un componente lineal que se encuentran entrelazados mecánicamente sin que se puedan separar, a pesar de que entre ellos no hay ningún enlace covalente. Los rotaxanos se han utilizado en diversas aplicaciones como máquinas moleculares, pero también como receptores de especies iónicas, sobre todo aniones, y en menor medida cationes metálicos. En el Departamento se ha desarrollado recientemente un [2]rotaxano basado en un macrociclo de éter corona y una diimida derivada del anhídrido piromelítico, funcionalizada con cadenas alifáticas. Este sistema es capaz de actuar como receptor de ciertos cationes metálicos, como iones Li^+ . También se han desarrollado rotaxanos similares basados en núcleos de naftalendiimida.

En esta propuesta se plantea la síntesis de un rotaxano basado en el mismo sistema de macrociclo de éter corona y diimida derivada del anhídrido piromelítico, pero funcionalizada con cadenas de etilenglicol en lugar de grupos alifáticos. Estas cadenas de etilenglicol pueden contribuir a la capacidad de interacción con el metal o bien competir con el sitio de unión, disminuyendo la interacción. Por tanto, se pretende estudiar la influencia de estos cambios estructurales en la capacidad de unión a cationes metálicos, comparando los resultados con los obtenidos para los sistemas descritos previamente.

Objetivos.

En esta propuesta de TFG se propone la síntesis y evaluación de su actividad como receptor de iones metálicos, de un rotaxano basado en un sistema de macrociclo de éter corona y diimida derivada del anhídrido piromelítico, funcionalizada con cadenas de etilenglicol.

Para ello se plantean los siguientes objetivos:

- Síntesis y caracterización de los diferentes compuestos orgánicos intermedios.
- Síntesis del [2]rotaxano propuesto.
- Evaluación de su asociación con iones metálicos y comparación de los resultados con sistemas descritos previamente.

Resumen de los trabajos a realizar por el estudiante/Plan de trabajo.

Las tareas a realizar por el alumno se encuadran dentro de la Síntesis Orgánica y la Química Supramolecular:

- Revisión bibliográfica sobre rotaxanos con capacidad de actuar como receptores de cationes.
- Síntesis y aislamiento de los compuestos orgánicos intermedios necesarios para la síntesis de las estructuras entrelazadas de tipo rotaxano.
- Síntesis y purificación de las estructuras de tipo rotaxano.
- Caracterización de los diferentes compuestos mediante las técnicas habituales de síntesis orgánica: RMN de ^1H y ^{13}C , espectrometría de masas, espectroscopia de infrarrojo y/o UV-Vis.
- Evaluación mediante valoraciones de UV-Vis de la capacidad de actuar como receptor de cationes metálicos, especialmente Li^+ , del [2]rotaxano preparado y comparación con otros sistemas ya descritos.

Una vez cumplimentado deberá ser enviado junto con el resto de propuestas del departamento en formato pdf al correo: gradoquimica@ugr.es. El nombre de cada fichero debe de coincidir con el código del TFG.

TIPOLOGÍA⁽²⁾

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.

En ambas modalidades el TFG no podrá tener carácter exclusivamente bibliográfico, pero si podrá ser teórico, experimental, o combinación de éstos.