UNIVERSIDAD DE GRANADA

FACULTAD DE CIENCIAS

Propuesta TFG. Curso 2024/2025

GRADO: Grado en Bioquímica

CÓDIGO DEL TFG: 261-055-2024/2025

1. DATOS BÁSICOS DEL TFG:

Título: Transferencia acoplada de protones y electrones en procesos biológicos

Descripción general (resumen y metodología):

La mayoría de los procesos químicos de relevancia en la obtención y aprovechamiento de energía implican la transferencia de protones y electrones, tanto en el caso de sistemas artificiales desarrollados por los humanos como en procesos biológicos que ocurren de forma natural. Un ejemplo de esto es la fotosíntesis natural, donde el centro activo del fotosistema II oxida agua a oxígeno generando protones y electrones que posteriormente se emplean en la reducción de CO2 para generar los compuestos necesarios para el desarrollo de las plantas. De igual forma, la fotosíntesis artificial es una estrategia desarrollada por los científicos que pretende imitar el proceso natural como método de aprovechamiento de energía solar renovable para la generación de combustibles limpios y sostenibles.

De esta forma, entender el mecanismo fundamental por el que los protones y electrones se transfieren es de vital importancia para comprender el funcionamiento de los sistemas catalíticos, tanto naturales como artificiales, y desarrollar nuevos procesos inspirados por la naturaleza con eficiencia y actividad. Un camino de reacción que ha demostrado jugar un papel fundamental en numerosas reacciones es lo que se conoce como transferencia acoplada de electrones y protones (PCET por sus siglas en ingles), en el que un protón y un electrón se transfieren de forma conjunta a una molécula substrato en un solo paso de reacción. Este tipo de reactividad ofrece importantes ventajas frente al mecanismo equivalente en el que el protón y el electrón se transfieren en pasos subsecuentes y diferenciados de reacción (ET-PT o PT-ET por sus siglas en inglés), ya que en este último se generan intermedios de alta energía con carga electrónica (positiva o negativa). Los procesos PCET permiten evitar esos intermedios energéticos.

A pesar de la aparente simplicidad de estas reacciones, los procesos PCET suponen desafíos fundamentales emocionantes tanto desde un punto de vista teórico, considerando una visión microscópica y cuántica del proceso, como práctico, referido a los aspectos químicos de los centros catalíticos que permitan acceder a estos caminos de reacción más favorables. Por tanto, este proyecto pretende realizar una revisión bibliográfica de los sistemas biológicos relevantes a procesos de conversión energética como la fotosíntesis o la reducción de N2 en los que las etapas PCET jueguen un papel fundamental.

Tipología: Estudio de casos, teóricos o prácticos, relacionados con la temática del Grado.

Objetivos planteados:

Objetivo general del TFG: que el estudiante obtenga una visión completa del desarrollo de un trabajo de revisión bibliográfica en el campo de la bioquímica y proporcionar las herramientas necesarias para la búsqueda, análisis y discusión de resultados previamente publicados desde un punto de vista crítico para ofrecer una perspectiva de utilidad al campo de investigación.

Para ello, este proyecto consta de tres objetivos científicos específicos:

1-Entender los principios fundamentales de los procesos PCET.

2-Evaluar las aspectos de los centros catalíticos que permitan acceder a procesos PCET.

3-Explorar los procesos bioógicos más relevantes que implican mecanismos basados en PCET.

Bibliografía básica:

1-Einsle, O.; Rees, D. C. Structural Enzymology of Nitrogenase Enzymes. Chem. Rev. **2020**, 120 (12), 4969–5004
2-Shafaat, H. S.; Yang, J. Y. Uniting biological and chemical strategies for selective CO2 reduction. Nat Catal **2021**, 4 (11), 928–933
3-Nocera, D. G. Proton-Coupled Electron Transfer: The Engine of Energy Conversion and Storage. J. Am. Chem. Soc. **2022**, 144, 3, 1069–1081
4-Lanzilotta, W. N., Christiansen, J., Dean, D. R. & Seefeldt, L. C. Evidence for coupled electron and proton transfer in the [8Fe-7S] cluster of nitrogenase. Biochemistry **37**, 11376–11384 (1998).

Recomendaciones y orientaciones para el estudiante:

Plazas: 1

2. DATOS DEL TUTOR/A:

Nombre y apellidos: PABLO GARRIDO BARROS

Ámbito de conocimiento/Departamento: QUÍMICA INORGÁNICA

Correo electrónico: pgarridobarros@ugr.es

3. COTUTOR/A DE LA UGR (en su caso):

Nombre y apellidos:

Ámbito de conocimiento/Departamento:

Correo electrónico:

4. COTUTOR/A EXTERNO/A (en su caso):

Nombre y apellidos:

Correo electrónico:

Nombre de la empresa o institución:

Dirección postal:

Puesto del tutor en la empresa o institución:

Centro de convenio Externo:

5. DATOS DEL ESTUDIANTE:

Nombre y apellidos:

Correo electrónico: