



19 OCT 2015

**FORMULARIO DE PROPOSTA DE TRABALLO FIN DE GRAO  
TIPO A: OFERTADOS POR DOCENTES**

ENTRADA Nº 235  
CURSO: 2015 / 2016

**Título:**

“Síntesis de líquidos iónicos dicatiónicos derivados de imidazolio”

**Titor do Traballo Fin de Grao:**

Nome e apelidos do titor: Emilia Tojo Suárez

Departamento: Química Orgánica

**Cotitor do Traballo Fin de Grao (de selo caso):**

Nome e apelidos do titor:

Departamento:

**Breve descrición do contido do Traballo Fin de Grao, indicando de forma concisa a metodoloxía e o plan de traballo:**

Los líquidos iónicos (LIs) son sales que contienen al menos un componente orgánico y presentan un punto de fusión menor de 100 °C. Considerando el amplio rango de posibles combinaciones catión/anión que pueden formar líquidos iónicos y sus numerosas aplicaciones, el interés por esta clase de compuestos ha ido aumentando de forma exponencial en los últimos años, debido a sus propiedades características, tales como gran estabilidad térmica, presión de vapor despreciable, gran capacidad como disolventes, etc....

Un tipo de LIs, todavía poco estudiados, que recientemente están despertando un gran interés, son los LIs dicatiónicos. Por ello, en este proyecto se plantea como principal objetivo el diseño y síntesis de una serie de LIs dicatiónicos derivados de imidazolio, en los que se incorporarán diferentes cadenas alquílicas entre los cationes y diferentes aniones. Para ello se aplicará el siguiente plan de trabajo:

1. **Revisión bibliográfica** sobre los LIs dicatiónicos derivados de imidazolio.

2. **Selección de cadenas alquílicas y aniones.**

2. **Síntesis de los LIs:** la síntesis se llevará a cabo aplicando reacciones de cuaternización, intercambio aniónico y los procedimientos habituales en síntesis orgánica. Se tomarán todas las precauciones necesarias para obtener LIs de gran pureza, tales como: destilación y secado de disolventes, optimización de condiciones de reacción, utilización de atmósfera inerte, etc....

3. **Caracterización estructural de los LIs sintetizados:**

Las estructuras de los LIs sintetizados serán confirmadas aplicando las técnicas espectroscópicas de Resonancia Magnética Nuclear (RMN) de  $^1\text{H}$ ,  $^{13}\text{C}$  y  $^{19}\text{F}$  y espectrometría de Masas.

**Lugar onde se realizará o traballo:**

Laboratorio nº 5 de la planta 3 de la Facultad de Química

A presente solicitude establece o compromiso por parte do/s titor/es de dispoñer dos medios materiais necesarios para a realización do traballo proposto.

Vigo, 16 de octubre de 2015

Vigo, ..... de ..... de .....

Sinatura do titor

Sinatura do cotitor



**FORMULARIO DE PROPOSTA DE TRABALLO FIN DE GRAO  
TIPO A: OFERTADOS POR DOCENTES**

20 OCT. 2015  
CURSO: 2015 / 2016  
ENTRADA N.º 239

**Título:**

Modificación do almacenamento de calor latente, calor sensible e da condutividade térmica de PCMs empregando nanoplaquetas

**Titor do Traballo Fin de Grao:**

Nome e apelidos do titor: Luis Lugo Latas

Departamento: Física Aplicada

**Cotitor do Traballo Fin de Grao (de selo caso):**

Nome e apelidos do titor: David Cabaleiro Álvarez

Departamento: Física Aplicada

**Breve descrición do contido do Traballo Fin de Grao, indicando de forma concisa a metodoloxía e o plan de traballo:**

O obxecto de estudo neste Traballo Fin de Grao está enmarcado nun proxecto máis amplo que trata sobre a proposta de novos fluídos máis eficaces e con mellores rendementos enerxéticos para a súa utilización en sistemas de transferencia e almacenamento de calor, especialmente aqueles utilizados en enerxías renovables. Neste TFG fixarémonos en particular nos materiais de cambio de fase, PCMs, utilizándoos como punto de partida para o deseño de novas dispersións baseadas en nanoplaquetas de grafeno. A metodoloxía docente consistirá en primeiro lugar en centrar o traballo mediante concisas lecturas recomendadas polos titores para a continuación realizar por parte da/o alumna/o unha procura bibliográfica sobre os aspectos relacionados coa materia baixo estudo como os métodos de preparación de dispersións de nanoaditivos, propiedades estudadas por outros investigadores, revisión de conceptos básicos, etc. Posteriormente a/o discente realizará un traballo experimental individual dentro do grupo de investigación levando a cabo unha caracterización dos nanoaditivos empregados estudando a súa estrutura, morfoloxía, distribución de tamaños, composición química, e así mesmo analizando a modificación que a adición dos nanomateriais provoca no calor latente de fusión, no calor sensible así como na condutividade térmica.

**Lugar onde se realizará o traballo:**

Grupo de Investigación FA2, Bloque C, Edificio de Ciencias

A presente solicitude establece o compromiso por parte do/s titor/es de dispoñer dos medios materiais necesarios para a realización do traballo proposto.

Vigo, 20 de Outubro de 2015

Sinatura do titor

Vigo, 20 de Outubro de 2015

Sinatura do cotitor

**COMISION DO TRABALLO DE FIN DE GRAO**

CURSO: ~~2015/2016~~ 2015

ENTRADA N.º 240

**FORMULARIO DE PROPOSTA DE TRABALLO FIN DE GRAO  
TIPO A: OFERTADOS POR DOCENTES**

**Título:**

Caracterización mecánica de fluidos térmicos para su uso en energías renovables

**Titor do Traballo Fin de Grao:**

Nome e apelidos do titor: Luis Lugo Latas

Departamento: Física Aplicada

**Cotitor do Traballo Fin de Grao (de selo caso):**

Nome e apelidos do titor: Silvia Gómez Barreiro

Departamento: Física Aplicada

**Breve descripción do contido do Traballo Fin de Grao, indicando de forma concisa a metodoloxía e o plan de traballo:**

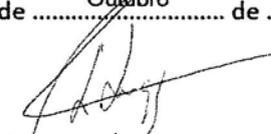
Los fluidos térmicos están siendo utilizados de forma asidua en plantas de acumulación de energía. Por supuesto, sus propiedades térmicas son de vital importancia a la hora de su utilización industrial. Pero también sus propiedades mecánicas ya que dichos fluidos están sometidos a diferentes esfuerzos mecánicos y diferentes temperaturas. La viscosidad del fluido puede variar de forma dramática en función de la temperatura, del esfuerzo mecánico y de la adicción de sólidos o aditivos. Es por ello de vital importancia la caracterización tanto de la viscosidad como del esfuerzo de fluencia, elasticidad y esfuerzos normales en las distintas condiciones mencionadas. Se utilizarán los equipos apropiados de laboratorio con control de temperatura para un estudio completo de las mencionadas propiedades mecánicas en situaciones industriales de temperatura y esfuerzo. Esto permitirá una mejor comprensión del comportamiento del fluido en condiciones de aplicación.

**Lugar onde se realizará o traballo:**

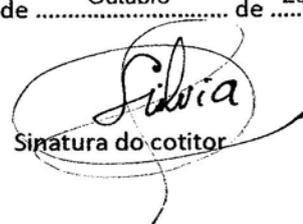
Grupo de Investigación FA2, Bloque C, Edificio de Ciencias

A presente solicitude establece o compromiso por parte do/s titor/es de dispoñer dos medios materiais necesarios para a realización do traballo proposto.

Vigo, 20 de Outubro de 2015

  
Sinatura do titor

Vigo, 20 de Outubro de 2015

  
Sinatura do cotitor

**FORMULARIO DE PROPOSTA DE TRABAJO FIN DE GRAO  
TIPO A: OFERTADOS POR DOCENTES**

Universidade de Vigo  
FACULTADE DE QUÍMICA  
DECANATO  
CURSO: 2015 / 2016  
20 OCT. 2015

**Título:**

Topología de las funciones densidad de energía electrónica en sistemas moleculares

**Titor do Traballo Fin de Grao:**

Nome e apelidos do titor: Ricardo Mosquera Castro

Departamento: Química Física

**Cotitor do Traballo Fin de Grao (de selo caso):**

Nome e apelidos do titor: David Ferro Costas

Departamento: Química Física

**Breve descripción do contido do Traballo Fin de Grao, indicando de forma concisa a metodoloxía e o plan de traballo:**

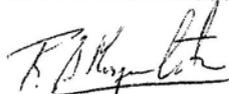
Las funciones densidad de energía electrónica juegan un papel importante en la teoría de átomos en moléculas (QTAIM). Por ejemplo, el valor de la densidad de energía electrónica total en ciertos puntos críticos de la densidad electrónica (conocidos como puntos de enlace) permite analizar si un enlace tiene carácter iónico o covalente. Los objetivos de este trabajo son: i) investigar la forma (topología) que presentan diferentes funciones de densidad de energía en sistemas moleculares modelo (preferentemente moléculas y iones diatómicos o sistemas poliatómicos con simetría); ii) concluir si es posible asignar algún significado físico a sus puntos críticos, cuencas de atracción o regiones definidas por ciertas isosuperficies.

**Lugar onde se realizará o traballo:**

Grupo de Química Cuántica, Departamento de Química Física, Facultad de Química

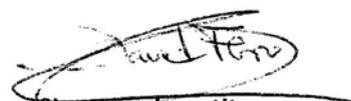
A presente solicitude establece o compromiso por parte do/s titor/es de dispoñer dos medios materiais necesarios para a realización do traballo proposto.

Vigo, 19 de octubre de 2015



Sinatura do titor

Vigo, 19 de octubre de 2015



Sinatura do cotitor



**FORMULARIO DE PROPOSTA DE TRABAJO FIN DE GRAO  
TIPO A: OFERTADOS POR DOCENTES**

CURSO: 2015 / 2016

ENTRADA Nº 242

**Título:**

Sistemas chiróticos LabOnChip compatibles

**Titor do Traballo Fin de Grao:**

Nome e apelidos do titor: José Lorenzo Alonso Gómez

Departamento: Química Orgánica

**Cotitor do Traballo Fin de Grao (de selo caso):**

Nome e apelidos do titor: Raquel Pereira Cameselle

Departamento: Química Orgánica

**Breve descripción do contido do Traballo Fin de Grao, indicando de forma concisa a metodoloxía e o plan de traballo:**

Según la ONU en el año 2050 más del 38% de la población en España tendrá más de 60 años de edad. Esto conduce inevitablemente a un aumento de las enfermedades crónicas y en la necesidad de un seguimiento médico personalizado. Para reducir los costos y ampliar la variedad de enfermedades controladas se requieren nuevas metodologías de detección. En los últimos años hemos desarrollado sistemas quirales que responden muy sensiblemente a la interacción con la luz. Lo más novedoso es que hemos sido capaces de desarrollar moléculas quirópticas "pegadas" a superficies de forma que se puedan implementar fácilmente en dispositivos pequeños.

Plan de trabajo a desarrollar:

- Estudio bibliográfico de dispositivos sensóricos.
- Desarrollo de monocapas moleculares mediante el autoensamblaje de nuestras estructuras derivadas con tioles y las placas metálicas semitransparentes desarrolladas.
- Estudio de las respuestas quirópticas de las monocapas moleculares y comparación con sus respuestas en disolución.
- Estudio de la estabilidad de las monocapas moleculares.
- Análisis del potencial que tienen los sistemas quirópticos LabOnChip compatibles para el desarrollo de sensores.

**Lugar onde se realizará o traballo:**

Departamento de Química Orgánica

A presente solicitude establece o compromiso por parte do/s titor/es de dispoñer dos medios materiais necesarios para a realización do traballo proposto.

Vigo, 19 de X de 2015

Vigo, 19 de X de 2015

Sinatura do titor

Sinatura do cotitor

COMISION DO TRABAJO DE FIN DE GRAO



**FORMULARIO DE PROPOSTA DE TRABALLO FIN DE GRAO  
TIPO A: OFERTADOS POR DOCENTES**

CURSO: 2015 / 2016

ENTRADA Nº 243

**Título:**

Síntesis de derivados de spirobifluorenos como precursores de materiales funcionales

**Titor do Traballo Fin de Grao:**

Nome e apelidos do titor: José Lorenzo Alonso Gómez

Departamento: Química Orgánica

**Cotitor do Traballo Fin de Grao (de selo caso):**

Nome e apelidos do titor: Raquel Pereira Cameselle

Departamento: Química Orgánica

**Breve descripción do contido do Traballo Fin de Grao, indicando de forma concisa a metodoloxía e o plan de traballo:**

Los espiranos son compuestos que se caracterizan por la unión perpendicular de dos ciclos a través de un carbono cuaternario (sp<sup>3</sup>) central. Particularmente, el espirobifluoreno (SBF) está formado por la unión de dos fluorenos a través del carbono espiránico y representa una estructura tridimensional rígida que lo convierte en una unidad de construcción poderosa para el desarrollo de materiales en la electrónica orgánica, particularmente para diodos emisores de luz orgánicos (OLEDs) y en dispositivos fotovoltaicos. Adicionalmente, se han desarrollado espiranos quirales para su empleo en catálisis asimétrica. No obstante, la ausencia de metodologías sintéticas ortogonales para la construcción de SBFs limita el acceso a materiales espiránicos tanto en OLEDs, fotovoltaica y catálisis como para la diversificación de su aplicabilidad.

El objetivo de este trabajo es la síntesis de un derivado ortogonal de espirobifluoreno que servirá como material de partida para la obtención de una batería de compuestos con gran diversidad estructural y con potencial aplicación en fotónica, OLEDs y catálisis.

Para ello se realizará:

- Búsqueda bibliográfica de antecedentes de síntesis de espirobifluorenos
- Propuesta de ruta sintética
- Desarrollo de la ruta sintética
- Caracterización de los productos

**Lugar onde se realizará o traballo:**

Departamento de Química Orgánica

A presente solicitude establece o compromiso por parte do/s titor/es de dispoñer dos medios materiais necesarios para a realización do traballo proposto.

Vigo, 19 de ..... X ..... de 2015

Vigo, 19 de ..... X ..... de 2015

Sinatura do titor

COMISION DO TRABALLO DE FIN DE GRAO

Sinatura do cotitor

CURSO: 2015 / 2016

ENTRADA N.º 244

**FORMULARIO DE PROPOSTA DE TRABAJO FIN DE GRAO  
TIPO A: OFERTADOS POR DOCENTES**

**Título:**

Utilización de la microextracción para el desarrollo de un método de análisis "verde"

**Titor do Traballo Fin de Grao:**

Nome e apelidos do titor: Isela Lavilla

Departamento: Química Analítica y Alimentaria

**Cotitor do Traballo Fin de Grao (de selo caso):**

Nome e apelidos do titor: Francisco Javier Pena Pereira

Departamento: Química Analítica y Alimentaria

**Breve descripción do contido do Traballo Fin de Grao, indicando de forma concisa a metodoloxía e o plan de traballo:**

El uso de sistemas miniaturizados en el laboratorio de Química Analítica es un objetivo fundamental de la Química Analítica Verde (GAC, *Green Analytical Chemistry*). En este sentido, las técnicas de microextracción permiten la eliminación o minimización de los volúmenes de disolvente utilizados, una prioridad dentro de la GAC. Las técnicas de microextracción, tanto en fase sólida (SPME, *Solid Phase Microextraction*) como en fase líquida (LPME, *Liquid Phase Microextraction*), han contribuido a la mejora de técnicas clásicas de preparación de muestra como la extracción en fase sólida (SPE, *Solid Phase Extraction*) y la extracción líquido-líquido (LLE, *Liquid-Liquid Extraction*). Los beneficios inherentes al uso de estas técnicas de microextracción incluyen: una generación de residuos insignificante, una exposición muy limitada del analista a las sustancias peligrosas, rapidez y simplificación en la etapa de preparación de muestra, y una reducción significativa de los costes.

En este proyecto fin de grado se propone el desarrollo de una nueva metodología analítica verde basada en el uso de técnicas de microextracción.

**Lugar onde se realizará o traballo:**

Laboratorio 10 (segunda planta)

A presente solicitude establece o compromiso por parte do/s titor/es de dispoñer dos medios materiais necesarios para a realización do traballo proposto.

Vigo, 19 de Octubre de 2015

Vigo, 19 de Octubre de 2015

Sinatura do titor

Sinatura do cotitor

COMISION DO TRABAJO DE FIN DE GRAO



**FORMULARIO DE PROPOSTA DE TRABAJO FIN DE GRAO  
TIPO A: OFERTADOS POR DOCENTES**

20 OCT 2015  
CURSO: 2015 / 2016

ENTRADA Nº 245

**Título:**

Desarrollo de sistemas analíticos preparados en papel

**Titor do Traballo Fin de Grao:**

Nome e apelidos do titor: Carlos Bendicho

Departamento: Química Analítica y Alimentaria

**Cotitor do Traballo Fin de Grao (de selo caso):**

Nome e apelidos do titor: Francisco Javier Pena Pereira

Departamento: Química Analítica y Alimentaria

**Breve descripción do contido do Traballo Fin de Grao, indicando de forma concisa a metodoloxía e o plan de traballo:**

El uso de materiales fácilmente accesibles, económicos y desechables para la preparación de sistemas de utilidad analítica ha alcanzado un importante interés dentro de la Química Analítica. Entre ellos, cabe destacar el alto grado de aceptación de los sistemas basados en papel, caracterizados por ser rápidos, simples, económicos y portátiles. Este soporte se utiliza con las nuevas tecnologías de la información y comunicación (ej. scanners, cámaras de fotos digitales, smartphones ...) para la detección de diversos analitos de interés.

En este proyecto fin de grado se propone el desarrollo de un sistema analítico basado en el empleo del papel. Entre otras actividades, se evaluarán distintas técnicas de fabricación de los sistemas analíticos, la compatibilidad de los mismos con diferentes reactivos químicos y/o disolventes, su estabilidad en distintas condiciones de almacenamiento, así como el efecto del empleo de los sistemas de detección no convencionales anteriormente mencionados.

**Lugar onde se realizará o traballo:**

Laboratorio 10 (segunda planta)

A presente solicitude establece o compromiso por parte do/s titor/es de dispoñer dos medios materiais necesarios para a realización do traballo proposto.

Vigo, 19 de Octubre de 2015

Vigo, 19 de Octubre de 2015

Sinatura do titor

Sinatura do cotitor

COMISION DO TRABAJO DE FIN DE GRAO



**FORMULARIO DE PROPOSTA DE TRABAJO FIN DE GRAO  
TIPO A: OFERTADOS POR DOCENTES**

CURSO: 150 / OCT 6 2015

ENTRADA N.º 246

**Título:**

Desarrollo y aplicación de nuevos disolventes, DES (Deep Eutectic Solvents), en la extracción de sustancias contaminantes.

**Titor do Traballo Fin de Grao:**

Nome e apelidos do titor: Begoña Gonzalez de Prado

Departamento: Ingeniería Química

**Cotitor do Traballo Fin de Grao (de selo caso):**

Nome e apelidos do titor: Ángeles Domínguez Santiago

Departamento: Ingeniería Química

**Breve descripción do contido do Traballo Fin de Grao, indicando de forma concisa a metodoloxía e o plan de traballo:**

El desarrollo de la actividad industrial llevado asociado un aumento del volumen de aguas residuales que, dependiendo de su procedencia, pueden contener gran cantidad de sustancias orgánicas y/o inorgánicas en concentraciones perjudiciales para el medioambiente (MA). Entre estas sustancias se encuentran los fenoles, sustancias altamente contaminantes y presentes en un gran número de procesos industriales. El objetivo principal de este trabajo consiste en el desarrollo y aplicación de nuevos disolventes de extracción como son los DES a en la eliminación/reducción del fenol presente en las corrientes de aguas residuales. Para realizar un análisis de la capacidad extractora de los nuevos disolventes se determinará experimentalmente el equilibrio líquido-líquido (ELL) de los sistemas formados por compuesto fenólico + agua + DES, a partir de rectas de reparto, empleando una celda de equilibrio encamisada termostatzada. La composición de las dos fases se determinará por técnicas espectrofotométricas (espectrofotómetro JASCO V30). A partir de los valores de concentración del compuesto fenólico en ambas fases (acuosa y LIH) se calcularán los correspondientes valores de selectividad y de coeficiente de distribución, lo que nos permitirá evaluar la capacidad extractora del disolvente (DES) estudiado.

**Lugar onde se realizará o traballo:**

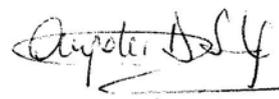
Edificio Isaac Newton

A presente solicitude establece o compromiso por parte do/s titor/es de dispoñer dos medios materiais necesarios para a realización do traballo proposto.

Vigo, 20 de Octubre de 2015

Vigo, 20 de Octubre de 2015

  
Sinatura do titor

  
Sinatura do cotitor



**FORMULARIO DE PROPOSTA DE TRABALLO FIN DE GRAO  
TIPO A: OFERTADOS POR DOCENTES**

CURSO: 215 / 10 / 16, 2015

ENTRADA Nº 247

**Título:**

Obtención y determinación de propiedades físicas de mezclas de baja temperatura de transición

**Titor do Traballo Fin de Grao:**

Nome e apelidos do titor: Ángeles Domínguez Santiago

Departamento: Ingeniería Química

**Cotitor do Traballo Fin de Grao (de selo caso):**

Nome e apelidos do titor: Begoña González de Prado

Departamento: Ingeniería Química

**Breve descripción do contido do Traballo Fin de Grao, indicando de forma concisa a metodoloxía e o plan de traballo:**

Las mezclas de baja temperatura de transición (LTTMs) se están considerando como nuevas alternativas a los disolventes convencionales dada su fácil preparación y unas propiedades físicas similares a los de los líquidos iónicos que suponen una ventaja frente a los disolventes orgánicos convencionales. En este trabajo se obtendrán diversos LTTMs, se determinarán sus propiedades físicas, se realizará el análisis térmico de los mismos, así como el estudio de su solubilidad en diversos compuestos orgánicos con el fin de analizar su posible aplicación como agentes de separación.

**Lugar onde se realizará o traballo:**

Edificio Isaac Newton, planta baja

A presente solicitude establece o compromiso por parte do/s titor/es de dispoñer dos medios materiais necesarios para a realización do traballo proposto.

Vigo, 20 de ..... octubre ..... de 2015

Vigo, 20 de ..... octubre ..... de .....

Sinatura do titor

Sinatura do cotitor



**FORMULARIO DE PROPOSTA DE TRABALLO FIN DE GRAO  
TIPO A: OFERTADOS POR DOCENTES**

CURSO: 215 / OCT. 16 2015

ENTRADA N.º 248

**Título:**

Síntese química de nanopartículas de ZnFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub>

**Titor do Traballo Fin de Grao:**

Nome e apelidos do titor: Verónica Salgueiriño Maceira

Departamento: Física Aplicada

**Cotitor do Traballo Fin de Grao (de selo caso):**

Nome e apelidos do titor:

Departamento:

**Breve descrición do contido do Traballo Fin de Grao, indicando de forma concisa a metodoloxía e o plan de traballo:**

Síntese química de nanopartículas de ZnFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub>, mediante descomposición térmica en disolución, en presenza de ligandos que controlen a forma final das mesmas.  
Dacordo as condicións indicadas, levarase a cabo a síntese de nanopartículas poliédricas, máis concretamente, con forma de octaedros truncados.  
Levarase a cabo tamén a caracterización estrutural e magnética das mesmas, co fin de relacionar o comportamento magnético coa composición química e forma das nanopartículas.

**Lugar onde se realizará o traballo:**

Lab. 14, Bloque C, 1º piso (Dpto. de Física Aplicada)

A presente solicitude establece o compromiso por parte do/s titor/es de dispoñer dos medios materiais necesarios para a realización do traballo proposto.

Vigo, 20 de outubro de 2015

Vigo, ..... de ..... de .....

Sinatura do titor

Sinatura do cotitor



**FORMULARIO DE PROPOSTA DE TRABAJO FIN DE GRAO  
TIPO A: OFERTADOS POR DOCENTES**

21 OCT. 2015  
CURSO: 2015/2016

ENTRADA N.º 251

**Título:**

**Aproximación a la síntesis de análogos del calcitriol con un átomo de azufre en el carbono C-22 de la cadena lateral**

**Titor do Traballo Fin de Grao:**

Nome e apelidos do titor: Yagamare FALL DIOP

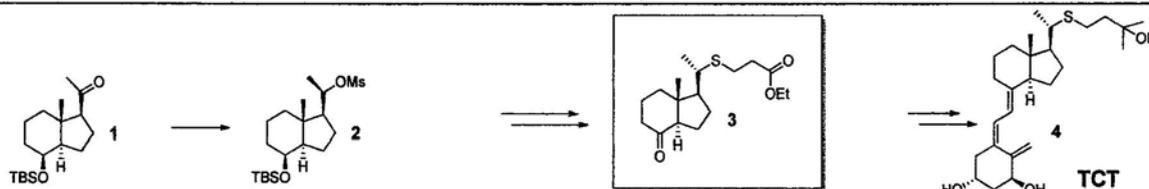
Departamento: Química Orgánica

**Cotitor do Traballo Fin de Grao (de selo caso):**

Nome e apelidos do titor: M<sup>a</sup> Generosa GÓMEZ PACIOS

Departamento: Química Orgánica

**Breve descripción do contido do Traballo Fin de Grao, indicando de forma concisa a metodoloxía e o plan de traballo:**



Se propone la síntesis del mesilato **2** mediante una reducción estereoselectiva de la cetona **1**. La cetona **1** se obtendría a partir del diol de Inhoffen fácilmente asequible por ozonólisis reductora de la vitamina D<sub>2</sub>. El compuesto **2** conduce al compuesto **3** precursor del análogo (**4**) de la vitamina D, utilizando una metodología desarrollada en nuestro grupo de investigación.<sup>1</sup> El análogo **4** (TCT) contiene un átomo de azufre en el C-22 de su cadena lateral y en la actualidad hay pocas síntesis descritas de esta clase de análogos en la bibliografía. El alumno podrá familiarizarse con técnicas habituales en síntesis orgánica tales como: manejo de disolventes secos, trabajo en atmósfera inerte, aislamiento y purificación de los compuestos obtenidos, mediante técnicas cromatográficas. Finalmente la caracterización de las estructuras se llevará a cabo por espectroscopía de RMN, IR y masas, y en su caso por difracción de rayos X

1) Y. Fall, O. Diouf, G. Gómez, T. Bolaño, *Tetrahedron Lett.* **2003**, *44*, 6069-6072

**Lugar onde se realizará o traballo:**

Laboratorio de investigación n.º 4 del Departamento de Química Orgánica

A presente solicitude establece o compromiso por parte do/s titor/es de dispoñer dos medios materiais necesarios para a realización do traballo proposto.

Vigo, 19 de Octubre de 2015

Sinatura do titor

Vigo, 19 de Octubre de 2015

Sinatura do cotitor

**COMISION DO TRABAJO DE FIN DE GRAO**



**FORMULARIO DE PROPOSTA DE TRABAJO FIN DE GRAO  
TIPO A: OFERTADOS POR DOCENTES**

CURSO: 2015/2016

ENTRADA N.º 250

**Título:**

**Aproximación a la síntesis de análogos del colesterol de tipo Gemini**

**Titor do Traballo Fin de Grao:**

Nome e apelidos do titor: M<sup>a</sup> Generosa GÓMEZ PACIOS

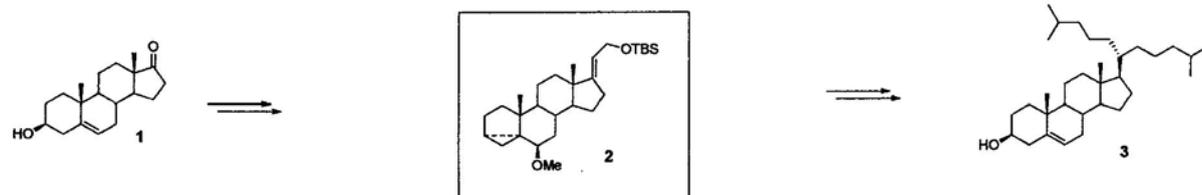
Departamento: Química Orgánica

**Cotitor do Traballo Fin de Grao (de selo caso):**

Nome e apelidos do titor: Yagamare FALL DIOP

Departamento: Química Orgánica

**Breve descripción do contido do Traballo Fin de Grao, indicando de forma concisa a metodoloxía e o plan de traballo:**



Se propone la síntesis del intermedio **2** a partir de la cetona comercial **1**. El intermedio **2** es precursor de **3**, análogo de tipo gemini del colesterol. Se utilizará una metodología desarrollada en nuestro grupo de investigación<sup>1</sup> que se ha utilizado con éxito en el campo de la vitamina D. El alumno podrá familiarizarse con técnicas habituales en síntesis orgánica tales como: manejo de disolventes secos, trabajo en atmosfera inerte, aislamiento y purificación de los compuestos obtenidos, mediante técnicas cromatográficas. Finalmente la caracterización de las estructuras se llevará a cabo por espectroscopía de RMN, IR y masas, y en su caso por difracción de rayos X

1) Y. Fall, G. Gómez, M. Pérez, Z. Gándara, X. Pérez, G. Pazos, G. Kurz, PCT Int. Appl. WO 2011121152 A1 201111006.

**Lugar onde se realizará o traballo:**

Laboratorio de investigación nº 4 del Departamento de Química Orgánica

A presente solicitude establece o compromiso por parte do/s titor/es de dispoñer dos medios materiais necesarios para a realización do traballo proposto.

Vigo, 19 de Octubre de 2015

Sinatura do titor

Vigo, 19 de Octubre de 2015

Sinatura do cotitor

**FORMULARIO DE PROPOSTA DE TRABALLO FIN DE GRAO  
TIPO A: OFERTADOS POR DOCENTES**

CURSO: 2015 / 2016

ENTRADA Nº 255

**Título:**

Estudio computacional de complejos lignosulfonato-metal-oxalato de interés en la interacción entre fertilizantes y suelo.

**Titor do Traballo Fin de Grao:**

Nome e apelidos do titor: Angeles Peña Gallego

Departamento: Química Física

**Cotitor do Traballo Fin de Grao (de selo caso):**

Nome e apelidos do titor: Marcos Mandado Alonso

Departamento: Química Física

**Breve descripción do contido do Traballo Fin de Grao, indicando de forma concisa a metodoloxía e o plan de traballo:**

La química computacional permite imaginar y estudiar sistemas químicos sin la necesidad de ser sintetizados. En este sentido y en el campo que aquí nos interesa nos permitiría estudiar las interacciones entre los elementos fundamentales de un fertilizante y el suelo. Con ello podríamos predecir que sistemas a priori funcionarían más adecuadamente.

En particular, nos centraríamos en la caracterización de algunos complejos metal-ligando inorgánico-sustancia húmica que creemos que puedan tener especial interés. Como ligandos inorgánicos se pueden probar compuestos característicos como fosfato, sulfato, citrato o lignosulfato. Los cationes metálicos analizados serán los que más comúnmente están presentes en los suelos: Ca<sup>2+</sup>, Fe<sup>3+</sup>, Al<sup>3+</sup>, Zn<sup>2+</sup> y Mg<sup>2+</sup>. Por último, los centros quelantes de las sustancias húmicas se modelizarán a través de las formas tradicionales de salicilato, oxalato y catecol.

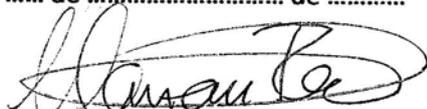
Para un trabajo fin de grado sería abarcable el análisis de los complejos con un determinado ligando inorgánico y un modelo de sustancia húmica y diferentes cationes metálicos. En este caso se propone optimizar las estructuras de los complejos lignosulfonato-metal-oxalato utilizando métodos de mecánica cuántica basados en la teoría del funcional de densidad (DFT). La optimización se realizará inicialmente en fase gas y después se tendrá en cuenta el efecto del disolvente utilizando un modelo continuo polarizable (PCM)

**Lugar onde se realizará o traballo:**

Facultad de Química

A presente solicitude establece o compromiso por parte do/s titor/es de dispoñer dos medios materiais necesarios para a realización do traballo proposto.

Vigo, 20 de octubre de 2015



Sinatura do titor

Vigo, 20 de octubre de 2015



Sinatura do cotitor



**FORMULARIO DE PROPOSTA DE TRABALLO FIN DE GRAO  
TIPO A: OFERTADOS POR DOCENTES**

CURSO: 15 OCT / 16

ENTRADA Nº 252

**Título:**

Diseño de líquidos iónicos para su aplicación en la extracción de compuestos fenólicos presentes en aguas residuales

**Titor do Traballo Fin de Grao:**

Nome e apelidos do titor: Begoña González de Prado

Departamento: Ingeniería Química

**Cotitor do Traballo Fin de Grao (de selo caso):**

Nome e apelidos do titor: Emilia Tojo Suárez

Departamento: Química Orgánica

**Breve descripción do contido do Traballo Fin de Grao, indicando de forma concisa a metodoloxía e o plan de traballo:**

Hoy en día los compuestos fenólicos están presentes como contaminantes en numerosas aguas residuales industriales tales como la industria papelera, agroalimentaria, petroquímica, farmacéutica... las mejores técnicas industriales, actuales, de eliminación y/o extracción de estos compuestos presentan numerosas desventajas como son el uso de compuestos orgánicos volátiles (altamente contaminantes) o limitaciones a la hora de extraer estos compuestos cuando se encuentran en pequeñas cantidades. Por esto, en este trabajo se propone el diseño de líquidos iónicos que sean capaces de extraer compuestos fenólicos. El plan de trabajo a desarrollar será el siguiente:

1. Síntesis de LIs: la síntesis se llevará a cabo aplicando reacciones de cuaternización, intercambio iónico y los procedimientos habituales en síntesis orgánica. Se tomarán todas las precauciones necesarias para obtener LIs de gran pureza, tales como: destilación y secado de disolventes, optimización de condiciones de reacción, utilización de atmósfera inerte,...
2. Caracterización estructural de los LIs sintetizados: las estructuras de los LIs sintetizados serán confirmadas aplicando técnicas espectroscópicas de RMN y espectrometría de masas.
3. Aplicación de los LI sintetizados: estudio de la capacidad extractiva de los líquidos iónicos sintetizados, para ello se determinará experimentalmente el equilibrio líquido-líquido. La composición de las dos fases se determinará por técnicas espectrofotométricas. Obteniendo los correspondientes valores de selectividad que nos permitirá evaluar la capacidad extractiva de los LIs sintetizados

**Lugar onde se realizará o traballo:**

Laboratorio n5 de la planta 3 de la Facultad de Química. Laboratorio 13 del Edificio Isaac Newton

A presente solicitude establece o compromiso por parte do/s titor/es de dispoñer dos medios materiais necesarios para a realización do traballo proposto.

Vigo, 21 de Octubre de 2015

Vigo, 21 de Octubre de 2105

Sinatura do titor

Sinatura do cotitor



**FORMULARIO DE PROPOSTA DE TRABALLO FIN DE GRAO  
TIPO A: OFERTADOS POR DOCENTES**

**CURSO: 2105 / 2016 2015**

ENTRADA Nº 253

**Título:**

Caracterización computacional de bases nitrogenadas adsorbidas sobre la superficie de nanografenos

**Titor do Traballo Fin de Grao:**

Nome e apelidos do titor: Marcos Mandado Alonso

Departamento: Química Física

**Cotitor do Traballo Fin de Grao (de selo caso):**

Nome e apelidos do titor: Ignacio Pérez Juste

Departamento: Química Física

**Breve descripción do contido do Traballo Fin de Grao, indicando de forma concisa a metodoloxía e o plan de traballo:**

Un gran número de técnicas de caracterización molecular empregadas en procesos de ultradetección química, requiren de un proceso previo de inmovilización do analito, que se realiza en moitos casos por adsorción sobre a superficie de un sustrato determinado. A caracterización do analito pode realizarse despois mediante o emprego de diferentes técnicas espectroscópicas. A combinación de adsorción en superficie e caracterización por espectroscopia Raman ha dado lugar a a técnica coñecida como "Surface Enhanced Raman Spectroscopy" (SERS). Esta técnica é de enorme aplicación en campos como a bioquímica e a nanomedicina, e en xeral onde sean necesarios sensores químicos con un alto poder de ultradetección.

Uno de los principales problemas en SERS, es la gran dependencia de las señales Raman (principalmente su intensidad) con la conformación que adquiere el analito una vez adsorbido sobre la superficie. No suele ser fácil resolver su estructura mediante el simple uso de los datos experimentales disponibles. En este aspecto la química computacional es una herramienta clave para poder interpretar los datos experimentales. El estudio de aspectos cinéticos y termodinámicos relacionados con el proceso de adsorción, puede realizarse mediante el empleo de técnicas computacionales basadas en la teoría del funcional de la densidad. La posterior simulación de los espectros Raman de las estructuras obtenidas y su comparación con los experimentales, aportan una información complementaria imprescindible para la interpretación de estos últimos a nivel molecular.

En este TFG se propone realizar la caracterización computacional de una de las cinco bases nitrogenadas que forman los ácidos nucleicos; adenina, citosina, guanina, timina o uracilo, adsorbidas sobre la superficie de una estructura de nanografeno. El grafeno es uno de los sustratos más prometedores hoy en día para su implementación en sensores de ultradetección química.

**Lugar onde se realizará o traballo:**

Seminario 9 de Química Física

A presente solicitude establece o compromiso por parte do/s titor/es de dispoñer dos medios materiais necesarios para a realización do traballo proposto.

Vigo, 21 de Outubro de 2015

Vigo, 21 de Outubro de 2015

Sinatura do titor

Sinatura do cotitor

**COMISION DO TRABALLO DE FIN DE GRAO**



**FORMULARIO DE PROPOSTA DE TRABALLO FIN DE GRAO  
TIPO A: OFERTADOS POR DOCENTES**

CURSO: 2015 / 2016  
21 OCT. 2015

**Título:**

Estudio computacional de complejos lignosulfonato-metal-salicilato de interés en la interacción entre fertilizantes y suelo.

ENTRADA Nº 254

**Titor do Traballo Fin de Grao:**

Nome e apelidos do titor: Ignacio Pérez Juste

Departamento: Química Física

**Cotitor do Traballo Fin de Grao (de selo caso):**

Nome e apelidos do titor: Angeles Peña Gallego

Departamento: Química Física

**Breve descripción do contido do Traballo Fin de Grao, indicando de forma concisa a metodoloxía e o plan de traballo:**

La química computacional permite imaginar y estudiar sistemas químicos sin la necesidad de ser sintetizados. En este sentido y en el campo que aquí nos interesa nos permitiría estudiar las interacciones entre los elementos fundamentales de un fertilizante y el suelo. Con ello podríamos predecir que sistemas a priori funcionarían más adecuadamente.

En particular, nos centraríamos en la caracterización de algunos complejos metal-ligando inorgánico-sustancia húmica que creemos que puedan tener especial interés. Como ligandos inorgánicos se pueden probar compuestos característicos como fosfato, sulfato, citrato o lignosulfato. Los cationes metálicos analizados serán los que más comúnmente están presentes en los suelos: Ca<sup>2+</sup>, Fe<sup>3+</sup>, Al<sup>3+</sup>, Zn<sup>2+</sup> y Mg<sup>2+</sup>. Por último, los centros quelantes de las sustancias húmicas se modelizarán a través de las formas tradicionales de salicilato, oxalato y catecol.

Para un trabajo fin de grado sería abarcable el análisis de los complejos con un determinado ligando inorgánico y un modelo de sustancia húmica y diferentes cationes metálicos. En este caso se propone optimizar las estructuras de los complejos lignosulfonato-metal-salicilato utilizando métodos de mecánica cuántica basados en la teoría del funcional de densidad (DFT). La optimización se realizará inicialmente en fase gas y después se tendrá en cuenta el efecto del disolvente utilizando un modelo continuo polarizable (PCM)

**Lugar onde se realizará o traballo:**

Facultad de Química

A presente solicitude establece o compromiso por parte do/s titor/es de dispoñer dos medios materiais necesarios para a realización do traballo proposto.

Vigo, 20 de octubre de 2015

Sinatura do titor

Vigo, 20 de octubre de 2015

Sinatura do cotitor



21 OCT. 2015

ENTRADA Nº

260

Universidade de Vigo

Facultade  
de Química

Campus de Vigo  
36310 Vigo  
España

Tel. 986 812 550  
Fax 986 812 556

quimica.uvigo.es  
decanatoquimica@uvigo.es

**FORMULARIO DE PROPOSTA DE TRABALLO FIN DE GRAO  
TIPO A: OFERTADOS POR DOCENTES**

**CURSO: 2015 / 2016**

**Título:**

Modelización molecular e catálise: mecanismos de deosixenación de subprodutos da biomasa.

**Titor do Traballo Fin de Grao:**

Nome e apelidos do titor: Olalla Nieto Faza

Departamento: Química Orgánica

**Cotitor do Traballo Fin de Grao (de selo caso):**

Nome e apelidos do titor: Marta Marín Luna

Departamento: Química Orgánica

**Breve descrición do contido do Traballo Fin de Grao, indicando de forma concisa a metodoloxía e o plan de traballo:**

Este traballo pretende empregar as ferramentas da Química Computacional e Modelización Molecular para describir os mecanismos de deosixenación de subprodutos do procesado da biomasa catalizados por metais de transición en elevado estado de oxidación. O obxectivo último é deseñar novos catalizadores máis eficientes e selectivos que permitan desenvolver vías para o aproveitamento de residuos agrícolas na industria química.

O molibdeno é un metal para o que se ten descrito actividade neste campo, pero aínda non se dispón de información apropiada sobre o mecanismo das distintas transformacións que cataliza. Como exemplo, analizaremos os mecanismos de obtención de ácido propiónico a partir de ácido láctico, (Gebink et al. Green Chem. 2013, 15, 982-988) xunto cos procesos laterais como dimerizacións ou condensacións que poden interferir no rendemento. Os resultados deste estudo serán empregados para elaborar un modelo de reactividade o máis xeral posible e propor modificacións no sistema de reacción para conseguir mellores rendementos, un menor custe enerxético e maior selectividade.

Os métodos empregados centraranse na teoría do funcional da densidade (DFT) para a optimización de mínimos e estados de transición ó longo dos distintos camiños de reacción e a análise das funcións de onda resultantes con métodos como NBO e/ou QTAIM.

**Lugar onde se realizará o traballo:**

Facultade de Química

A presente solicitude establece o compromiso por parte do/s titor/es de dispoñer dos medios materiais necesarios para a realización do traballo proposto.

Vigo, 20 de Outubro de 2015

Sinatura do titor

Vigo, 20 de Outubro de 2015

Sinatura do cotitor



**FORMULARIO DE PROPOSTA DE TRABALLO FIN DE GRAO  
TIPO A: OFERTADOS POR DOCENTES**

CURSO: 2015 / 2016  
2<sup>a</sup> OCT. 2015

**Título:**

ENTRADA N.º 261

Química Supramolecular: Complejos "Receptor-Sustrato" (Host-Guest) basados en ciclodextrinas

**Titor do Traballo Fin de Grao:**

Nome e apelidos do titor: Pablo Hervés Beloso

Departamento: Química Física

**Cotitor do Traballo Fin de Grao (de selo caso):**

Nome e apelidos do titor: Jorge Pérez Juste

Departamento: Química Física

**Breve descripción do contido do Traballo Fin de Grao, indicando de forma concisa a metodoloxía e o plan de traballo:**

O proxecto terá como principal obxectivo o estudo das interaccións receptor-sustrato entre os macrociclos ciclodextrinas e diferentes sustratos mediante calorimetría isoterma de valoración (ITC, das súas siglas en inglés).

Os obxectivos específicos son os seguintes:

- Adquirir os coñecementos básicos da calorimetría isoterma de valoración
- Evaluar a interacción da ciclodextrina e sustratos con diferente grado de hidrofobicidade
- Desenvolvemento de modelos teóricos que reproduzan os datos experimentais
- Determinación dos diferentes parámetros termodinámicos da interacción

**Lugar onde se realizará o traballo:**

Laboratorio QF, planta 2, lab 4-5

A presente solicitude establece o compromiso por parte do/s titor/es de dispoñer dos medios materiais necesarios para a realización do traballo proposto.

Vigo, 21 de outubro de 2015

Sinatura do titor

Vigo, 21 de outubro de 2015

Sinatura do cotitor



ENTRADA Nº 262

**FORMULARIO DE PROPOSTA DE TRABALLO FIN DE GRAO  
TIPO A: OFERTADOS POR DOCENTES**

**CURSO:** 2015 / 2016

**Título:**

Aproximación á síntese do composto natural Alotamida A

**Titor do Traballo Fin de Grao:**

Nome e apelidos do titor: Rosana Álvarez Rodríguez

Departamento: Química Orgánica

**Cotitor do Traballo Fin de Grao (de selo caso):**

Nome e apelidos do titor: José Antonio Souto

Departamento: Química Orgánica

**Breve descripción do contido do Traballo Fin de Grao, indicando de forma concisa a metodoloxía e o plan de traballo:**

A síntese total de produtos naturais permite a determinación estrutural inequívoca destes metabolitos secundarios, así como a posterior preparación de análogos unha vez establecida unha ruta sintética eficiente.

O traballo de fin de grao abordará a preparación do fragmento tripeptídico clave na síntese do produto natural Alotamida A, un metabolito secundario que presenta unha prometedora actividade reguladora dos canais de calcio.

O proxecto desenrola a síntese multietapa do fragmento desexado empregando técnicas contemporáneas en síntese orgánica, require a purificación tanto de intermedios como do produto final así como a completa caracterización dos mesmos empregando RMN, MS e difracción de RX.

Plan de traballo: 1) Elaboración do plan sintético (estratexia Boc vs. estratexia Fmoc); 2) Identificación dos grupos protectores adecuados; 3) Estudo da reacción de formación do enlace amida, síntese do fragmento tripeptídico lineal; 4) Estudo da reacción de formación da tiazolina.

**Lugar onde se realizará o traballo:**

Departamento de Química Orgánica. Facultade de Química

A presente solicitude establece o compromiso por parte do/s titor/es de dispoñer dos medios materiais necesarios para a realización do traballo proposto.

Vigo, 21 de Outubro de 2015

Rosana Álvarez Rodríguez  
Sinatura do titor

Vigo, 21 de Outubro de 2015

José A. SOUTO SALGADO  
Sinatura do cotitor



**FORMULARIO DE PROPOSTA DE TRABALLO FIN DE GRAO  
TIPO A: OFERTADOS POR DOCENTES**

CURSO: 2015 DC 2016

ENTRADA N.º 264

**Título:**

Estudio teórico de los mecanismos de generación de hidrógeno molecular mediante clusters metálicos

**Titor do Traballo Fin de Grao:**

Nome e apelidos do titor: Jesús R. Flores Rodríguez

Departamento: Química Física

**Cotitor do Traballo Fin de Grao (de selo caso):**

Nome e apelidos do titor:

Departamento:

**Breve descrición do contido do Traballo Fin de Grao, indicando de forma concisa a metodoloxía e o plan de traballo:**

Los procesos de generación de hidrógeno molecular mediante la reacción de agregados de átomos metálicos tipo cluster en condiciones de microhidratación tienen gran interés químico y tecnológico. Se han estudiado experimentalmente, en algunos casos, mediante reactores de flujo. Sin embargo, muchos aspectos como los mecanismos moleculares o los factores estructurales y energéticos que determinan la reactividad, así como la escala temporal de dichos procesos apenas se conocen. Se realizará un estudio teórico de un proceso con un nivel de complejidad adecuado que podrá comprender varias etapas. En primer lugar se analizará la estructura del cluster, así como el proceso de adsorción de moléculas de agua. Se abordarán los mecanismos moleculares de ruptura de la molécula de agua, así como los de generación de hidrógeno molecular. Se prestará especial atención a los posibles mecanismos catalíticos mediante cadenas de Grotthuss. Finalmente, si es viable, se realizará un análisis dinámico en orden a establecer la escala temporal de la generación de hidrógeno molecular y los factores que en ella influyen. La propuesta de trabajo, como se ha dicho, es de naturaleza teórica. El alumno se familiarizará con el uso de programas informáticos para el cálculo de la estructura electrónica, así como con otros destinados a la realización del análisis dinámico, bien mediante distintas formulaciones de la Teoría del Estado de Transición o empleando métodos de Dinámica Molecular. Se familiarizará también con el uso de estaciones de cálculo en entorno Unix(Linux) así como de software de visualización.

**Lugar onde se realizará o traballo:**

Cuarto número 2, Química Física, 2º Piso de la Facultad de Química

A presente solicitude establece o compromiso por parte do/s titor/es de dispoñer dos medios materiais necesarios para a realización do traballo proposto.

Vigo, 21 de Octubre de 2015

Vigo, ..... de ..... de .....

Sinatura do titor

Sinatura do cotitor



**FORMULARIO DE PROPOSTA DE TRABALLO FIN DE GRAO  
TIPO A: OFERTADOS POR DOCENTES**

CURSO: 2015 / 16

ENTRADA N.º 266

Título:

**Estudio de propiedades de sistemas supramoleculares organizados**

Titor do Traballo Fin de Grao:

Nome e apelidos do titor: Inmaculada Prieto Jiménez

Departamento: Química Física

Cotitor do Traballo Fin de Grao (de selo caso):

Nome e apelidos do titor:

Departamento:

Breve descripción do contido do Traballo Fin de Grao, indicando de forma concisa a metodoloxía e o plan de traballo:

El trabajo propuesto pretende estudiar las propiedades como sensores de sistemas supramoleculares organizados, mediante la integración de distintas técnicas experimentales. Los compuestos derivados de ligandos salicilaldehído benzoilhidrazona poseen grupos capaces de establecer enlaces de H, tanto intra- como intermoleculares. Además, los grupos funcionales quinona muestran propiedades en el reconocimiento de aniones y la catálisis de reacciones de oxidorreducción de compuestos de interés como NADH, hidrazina... En base a estas características, se pretende diseñar sistemas basados en la organización de moléculas individuales, con estructura y propiedades predefinidas.

El plan de trabajo se desarrollará en las siguientes fases: 1. Revisión bibliográfica; 2. Caracterización de compuestos en disolución; 3. Fabricación de sistemas sobre distintos soportes (vidrio, electrodo...) y estudio de propiedades; 5) Elaboración de memoria TFG.

Entre las técnicas que se utilizarán se encuentran espectroscopías UV-Vis e IR, y electroquímica.

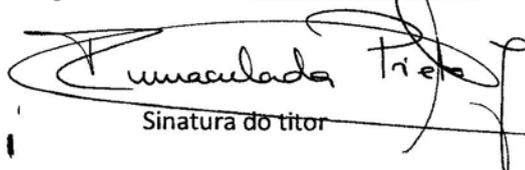
Lugar onde se realizará o traballo:

Departamento Química Física, Laboratorio 5, planta 2.

A presente solicitude establece o compromiso por parte do/s titor/es de dispoñer dos medios materiais necesarios para a realización do traballo proposto.

Vigo, 21 de octubre de 2015

Vigo, ..... de ..... de .....

  
Sinatura do titor

Sinatura do cotitor

13 OCT. 2015

Campus de Vigo  
36310 Vigo  
España

Tel. 986 812 550  
Fax 986 812 556

quimica.uvigo.es  
decanatoquimica@uvigo.es

ENTRADA Nº 220

**FORMULARIO DE PROPOSTA DE TRABAJO FIN DE GRAO  
TIPO B: PROPOSTO POR UN ESTUDANTE E AVALADO POR DOCENTES**

**CURSO:** 2015 / 2016

**Título:**

Estudio computacional de reacciones electrocíclicas de ciclodecatrienonas

**Nome e apelidos do estudante que fai a proposta:**

Tomás Piñeiro Blanco

**Titor que avala a proposta de Trabajo Fin de Grao:**

Nome e apelidos do titor: Angel Rodríguez de Lera

Departamento: Química Orgánica

**Cotitor do Trabajo Fin de Grao (de selo caso):**

Nome e apelidos do titor: Adán B. González Pérez

Departamento: Química Orgánica

**Breve descripción do contido do Trabajo Fin de Grao, indicando de forma concisa a metodoloxía e o plan de traballo:**

Estudio computacional empleando DFT, de la reacción de electrociclación térmica de ciclodecatrienonas y sus correspondientes derivados con heteroátomos.

- Cálculos DFT al nivel wB97XD/6-31++G(d,p) con Gaussian09 de reacciones de electrociclación de los isómeros geométricos (E,Z,E) y (E,Z,Z)-ciclodecatrienonas.
- Análisis de la aromaticidad de las estructuras de transición usando NICS.
- Estudio del efecto del disolvente en la reacción de electrociclación.

MES 1: Estudio de la reacción de electrociclación. Estimación de las barreras de activación de los procesos.

MES 2: Análisis y predicción del efecto de los sustituyentes en la trienona. Estudio de la torqueselectividad en trienos con un sustituyente adicional en la olefina terminal.

MES 3: Análisis del efecto de los heteroátomos en la ciclodecatrienona.

MES 4: Corroboración de las propuestas mecanísticas que explican la obtención de las ciclodecatrienonas por reordenamiento de acetatos g-furilpropargílicos.

**Lugar onde se realizará o traballo:**

Departamento de Química Orgánica

A presente solicitude establece o compromiso por parte do/s titor/es de dispoñer dos medios materiais necesarios para a realización do traballo proposto.

Vigo, 13 de octubre de 2015.

Sinatura do estudante

Vigo, 13 de octubre de 2015.

Sinatura do titor

Vigo, 13 de octubre de 2015.

Sinatura do cotitor

**COMISION DO TRABAJO DE FIN DE GRAO**

13 OCT. 2015

ENTRADA Nº 221

**FORMULARIO DE PROPOSTA DE TRABALLO FIN DE GRAO**  
**TIPO B: PROPOSTO POR UN ESTUDANTE E AVALADO POR DOCENTES**

**CURSO:** 2015 / 2016

**Título:**

**SÍNTESIS TOTAL DE ALCALOIDES DERIVADOS DEL INDOL**

**Nome e apelidos do estudante que fai a proposta:**

Luis Nóvoa Rodríguez

**Titor que avala a proposta de Traballo Fin de Grao:**

Nome e apelidos do titor: Angel Rodríguez de Lera

Departamento: Química Orgánica

**Cotitor do Traballo Fin de Grao (de selo caso):**

Nome e apelidos do titor: Patricia García Domínguez

Departamento: Química Orgánica

**Breve descripción do contido do Traballo Fin de Grao, indicando de forma concisa a metodoloxía e o plan de traballo:**

Los alcaloides derivados del indol contienen a menudo sustituyentes prenilados y otros aminoácidos. Estos alcaloides presentan actividades diversas, como aniquiladores de radicales, agentes de protección contra UV-A, inmunomoduladores y antibacterianos. El trabajo de fin de grado abordará la preparación de alguno de los alcaloides del grupo empleando una reacción de prenilación de derivados de indol halogenados con reactivos de boro catalizada por complejos de Pd. El proyecto desarrolla la síntesis multietapa de un producto natural empleando síntesis orgánica, requiere purificación de intermedios y productos finales y la caracterización estructural de los mismos empleando RMN, MS y difracción de RX. Plan de trabajo: 1) Preparación de derivados de indol; 2) Formación de dicetopiperazinas; 3) Halogenación de derivados de indol en C2; 4) Acoplamiento catalizado por Pd de derivados de boro prenilados; 5) Estudio de la regioselectividad en el caso de derivados bis-halogenados en C2 y C7.

**Lugar onde se realizará o traballo:**

Departamento de Química Orgánica

A presente solicitude establece o compromiso por parte do/s titor/es de dispoñer dos medios materiais necesarios para a realización do traballo proposto.

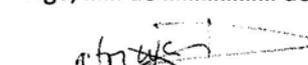
Vigo, 13 de octubre de 2015

  
Sinatura do estudante

Vigo, 13 de octubre de 2015

  
Sinatura do titor

Vigo, 13 de octubre de 2015

  
Sinatura do cotitor

**COMISION DO TRABALLO DE FIN DE GRAO**

14 OCT. 2015

Campus de Vigo  
 36310 Vigo  
 España

Tel. 986 812 550  
 Fax 986 812 556

quimica.uvigo.es  
 decanatoquimica@uvigo.es

ENTRADA N.º 224

FORMULARIO DE PROPOSTA DE TRABALLO FIN DE GRAO CURSO: 2015/ 2016  
 TIPO B: PROPOSTO POR UN ESTUDANTE E AVALADO POR DOCENTES

Título:

Estudo da estrutura do cristal líquido formado por cromolina e arxinina

Nome e apelidos do estudante que fai a proposta:

María del Carmen Costas Couso

Titor que avala a proposta de Traballo Fin de Grao:

Nome e apelidos do titor: María Magdalena Cid

Departamento: Química Orgánica

Breve descrición do contido do Traballo Fin de Grao, indicando de forma concisa a metodoloxía e o plan de traballo:

**Obxectivo:**

Preparar e caracterizar o cristal líquido formado por cromolina (1) e arxinina (2). Utilizar a sinerxia de diferentes técnicas espectroscópicas no eido da caracterización estrutural.

**Metodoloxía:**

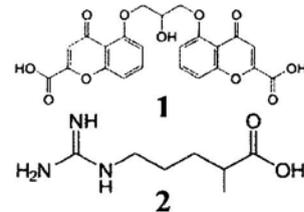
A metodoloxía docente consistirá nun traballo experimental individual por parte do alumno dentro do grupo de investigación "síntese, simulación e espectroscopia" pertencente ao departamento Química Orgánica. A caracterización deste sistema levarase a cabo mediante as técnicas usuais de caracterización de sistemas supramoleculares, tales como RMN, microscopía óptica con polarizadores cruzados (POM), reoloxía e dispersión de raios X.

Ao principio de cada semana planificarase conxuntamente o traballo a realizar e analizarase o traballo realizado co fin de optimizar tempo e recursos.

O alumno tamén asistirá e participará nas reunións de grupo semanais que se desenvolven en inglés na que todos os membros expoñen resultados de investigación e bibliografía.

**Plan de traballo:**

1. Búsqueda bibliográfica de sistemas semellantes. Dopaxe de cristais líquidos con moléculas pequenas quirais.
2. Preparación do sistema cromolina/arxinina con distintas proporcións.
3. Caracterización espectroscópica por RMN (<sup>13</sup>C e <sup>1</sup>H), POM, reoloxía e dispersión de raios X.
4. Elaboración dun informe final que inclúa a análise dos resultados e conclusións para unha defensa pública.



Lugar onde se realizará o traballo:

Citexvi, planta -1, laboratorio S<sup>3</sup>

A presente solicitude establece o compromiso por parte do/s titor/es de dispoñer dos medios materiais necesarios para a realización do traballo proposto.

Vigo, 13 de outubro de 2015

Vigo, 13 de outubro de 2015

Vigo, ..... de ..... de

Sinatura do estudante

*M. C. Costas*

Sinatura do titor

*M. M. Cid*

Sinatura do cotitor

COMISION DO TRABALLO DE FIN DE GRAO



**FORMULARIO DE PROPOSTA DE TRABALLO FIN DE GRAO**  
**TIPO B: PROPOSTO POR UN ESTUDANTE E AVALADO POR DOCENTES**

CURSO: 2015 / 2016

**Título:**

Estudio computacional de reacciones de Diels-Alder intramoleculares

**Nome e apelidos do estudante que fai a proposta:**

Francisco Riquelme Vázquez

**Titor que avala a proposta de Traballo Fin de Grao:**

Nome e apelidos do titor: ROSANA ALVAREZ RODRIGUEZ

Departamento: Química Orgánica

**Cotitor do Traballo Fin de Grao (de selo caso):**

Nome e apelidos do titor: Adán B. González Pérez

Departamento: Química Orgánica

**Breve descripción do contido do Traballo Fin de Grao, indicando de forma concisa a metodoloxía e o plan de traballo:**

Estudio computacional empleando DFT, de la reacción de Diels-Alder intramolecular.  
- Cálculos DFT al nivel wB97XD/6-31++G(d,p) con Gaussian09 de reacciones de Diels-Alder con activación térmica y en presencia de ácidos de Lewis.  
- Análisis de la aromaticidad de las estructuras de transición usando NICS.  
- Estudio del efecto del disolvente en la reacción.

MES 1: Estudio de la reacción de Diels-Alder intramolecular para formar decalinas. Estimación de las barreras de activación de los procesos de cicloadición exo y endo en ambas caras enantiotópicas de aldehídos y ésteres insaturados.

MES 2: Análisis y predicción del efecto de los sustituyentes carbonados y heteroatómicos en posiciones alílicas.

MES 3: Análisis del efecto de los dobles enlaces conjugados en el dieno.

MES 4: Elaboración de la memoria.

**Lugar onde se realizará o traballo:**

Departamento de Química Orgánica

A presente solicitude establece o compromiso por parte do/s titor/es de dispoñer dos medios materiais necesarios para a realización do traballo proposto.

Vigo, 13 de outubro de 2015

Sinatura do estudante

Vigo, 13 de outubro de 2015

Sinatura do titor

Rosana Alvarez

Vigo, 13 de outubro de 2015

Sinatura do cotitor

Adán B. González

COMISION DO TRABALLO DE FIN DE GRAO

15 OCT. 2015

ENTRADA Nº 227

**FORMULARIO DE PROPOSTA DE TRABALLO FIN DE GRAO**  
**TIPO B: PROPOSTO POR UN ESTUDANTE E AVALADO POR DOCENTES**

**CURSO:** 2015 / 2016

**Título:**

Estudo e optimización do efecto Leidenfrost en superficies nanoestructuradas

**Nome e apelidos do estudante que fai a proposta:**

Andrea Mariño López

**Titor que avala a proposta de Traballo Fin de Grao:**

Nome e apelidos do titor: Miguel Ángel Correa-Duarte

Departamento: Química Física

**Cotitor do Traballo Fin de Grao (de selo caso):**

Nome e apelidos do titor:

Departamento:

**Breve descrición do contido do Traballo Fin de Grao, indicando de forma concisa a metodoloxía e o plan de traballo:**

O obxectivo a alcanzar durante o traballo de Fin de Grao é o estudo e optimización do efecto Leidenfrost en superficies nanoestructuradas. Para elo levarase a cabo un proceso de tratamento de distintos tipos de nanomateriais ata alcanzar as características requiridas pola aplicación. Traballarase na dispersión, oxidación e filtrado de nanotubos de carbono. O estudante familiarizarase, a súa vez, coa metodoloxía de caracterización eléctrica e de espectroscopía, e con instrumentos como o espectrofotómetro, fontes medidoras, estacións para medidas a catro puntas, sistemas de medición e adquisición remota de temperatura, etc.

Plan de traballo:

- \*Funcionalizar os nanotubos de carbono
- \*Obtención de películas delgadas de nanotubos de carbono
- \*Caracterización eléctrica das películas obtidas

**Lugar onde se realizará o traballo:**

Facultad de Química, Laboratorio 3, 2ª planta

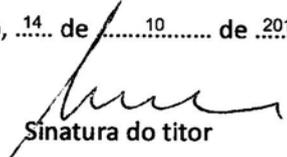
A presente solicitude establece o compromiso por parte do/s titor/es de dispoñer dos medios materiais necesarios para a realización do traballo proposto.

Vigo, 14 de .....10..... de 2015

Vigo, 14 de .....10..... de 2015

Vigo, ..... de ..... de .....

  
Sinatura do estudante

  
Sinatura do titor

Sinatura do cotitor

**COMISION DO TRABALLO DE FIN DE GRAO**

15 OCT. 2015

Campus de Vigo  
36310 Vigo  
España

Tel. 986 812 550  
Fax 986 812 556

quimica.uvigo.es  
decanatoquimica@uvigo.es

ENTRADA Nº 228

**FORMULARIO DE PROPOSTA DE TRABALLO FIN DE GRAO**  
**TIPO B: PROPOSTO POR UN ESTUDANTE E AVALADO POR DOCENTES**

**CURSO:** 2015 / 2016

**Título:**

Síntesis de estructuras híbridas piridazinona ditiocarbamato con potencial actividad farmacológica

**Nome e apelidos do estudante que fai a proposta:**

Paula Mondelo Macía

**Titor que avala a proposta de Traballo Fin de Grao:**

Nome e apelidos do titor: M<sup>a</sup> del Carmen Terán Moldes

Departamento: Química Orgánica

**Cotitor do Traballo Fin de Grao (de selo caso):**

Nome e apelidos do titor: Pedro Besada Pereira

Departamento: Química Orgánica

**Breve descripción do contido do Traballo Fin de Grao, indicando de forma concisa a metodoloxía e o plan de traballo:**

El objetivo global del proyecto es desarrollar nuevos fármacos potenciales que resultan de combinar dos eslabones estructurales con un amplio potencial farmacológico, el núcleo de piridazinona y el fragmento ditiocarbamato. Así, se propone la síntesis de algunos compuestos de estructura híbrida piridazinona/ditiocarbamato, en los que el grupo ditiocarbamato se incorpora al anillo de piridazinona a través del átomo de S o del átomo de N.

Dicha síntesis implicará la construcción del anillo de piridazina convenientemente funcionalizado, seguida de la inclusión del fragmento de ditiocarbamato. Para ello se adecuarán metodologías sintéticas previamente descritas. Se utilizará una secuencia sintética que implica varias etapas y en algún caso la utilización de grupos protectores. Se realizarán distintos tipos de reacciones, que requieren variaciones en las condiciones de temperatura, el trabajo en atmósfera inerte, el uso de disolventes secos y también el uso de distintas técnicas de aislamiento, purificación y caracterización de productos. Los compuestos propuestos, una vez obtenidos, se someterán a un cribado farmacológico. Se analizarán y se procesarán los resultados químicos y biológicos obtenidos.

**Lugar onde se realizará o traballo:**

Laboratorios del Departamento de Química Orgánica, Facultade de Química

A presente solicitude establece o compromiso por parte do/s titor/es de dispoñer dos medios materiais necesarios para a realización do traballo proposto.

Vigo, 15 de outubro de 2015.

Sinatura do estudante

Vigo, 15 de outubro de 2015.

Sinatura do titor

Vigo, 15 de outubro de 2015.

Sinatura do cotitor

**COMISION DO TRABALLO DE FIN DE GRAO**



ENTRADA Nº 322  
CURSO: 2015 / 2016

**FORMULARIO DE PROPOSTA DE TRABAJO FIN DE GRAO  
TIPO B: PROPOSTO POR UN ESTUDANTE E AVALADO POR DOCENTES**

**Título:**

Fabricación de nanopartículas plasmónicas codificadas con moléculas activas en Raman

**Nome e apelidos do estudante que fai a proposta:**

Soraya Pintos Martínez

**Titor que avala a proposta de Trabajo Fin de Grao:**

Nome e apelidos do titor: Isabel Pastoriza Santos

Departamento: QF

**Cotitor do Trabajo Fin de Grao (de selo caso):**

Nome e apelidos do titor: Jorge Pérez Juste

Departamento: QF

**Breve descripción do contido do Trabajo Fin de Grao, indicando de forma concisa a metodoloxía e o plan de traballo:**

O proxecto terá como principal obxectivo a fabricación de nanopartículas plasmónicas codificadas para detección por SERS.

Os obxetivos específicos deste proxecto son os seguintes:

- Síntese de partículas plasmónicas de ouro por métodos de química coloidal. Caracterización estrutural mediante microscopía electrónica e das propiedades ópticas mediante espectroscopía de absorción UV-visible.
- Encapsulación en cápsulas poliméricas de PNIPAM. Caracterización estrutural (mediante microscopía electrónica), químico-física (potencial Zeta) e das propiedades ópticas (mediante espectroscopía de absorción UV-visible).
- Codificación con moléculas activas en Raman. Caracterización da súa eficiencia Raman (espectroscopía Raman).
- Bioconjugación con biomoléculas. Caracterización estrutural (mediante microscopía electrónica), químico-física (potencial Zeta) e das propiedades ópticas (mediante espectroscopía de absorción UV-visible).

**Lugar onde se realizará o traballo:**

Laboratorio QF, planta 2, lab 4-5

A presente solicitude establece o compromiso por parte do/s titor/es de dispoñer dos medios materiais necesarios para a realización do traballo proposto.

Vigo, 19 de outubro de 2015.

Sinatura do estudante

Vigo, 19 de outubro de 2015.

Sinatura do titor

Vigo, 19 de outubro de 2015.

Sinatura do cotitor



19 Oct. 2015

FORMULARIO DE PROPOSTA DE TRABALLO FIN DE GRAO **ENTRADA Nº 233** CURSO: 2015/2016  
TIPO B: PROPOSTO POR UN ESTUDANTE E AVALADO POR DOCENTES

Título:

Síntese e caracterización de compostos simples con quiralidade axial: análogo dimetilado do ácido de Fecht

Nome e apelidos do estudante que fai a proposta:

Noelia López da Costa

Titor que avala a proposta de Traballo Fin de Grao:

Nome e apelidos do titor: María Magdalena Cid

Departamento: Química Orgánica

Breve descrición do contido do Traballo Fin de Grao, indicando de forma concisa a metodoloxía e o plan de traballo:

**Obxectivo:**

Sintetizar e caracterizar o análogo dimetilado do ácido de Fecht tanto en forma racémica como enantiopuro. Utilizar a sinerxia de diferentes técnicas espectroscópicas no eido da caracterización estrutural.



**Metodoloxía:**

A metodoloxía docente consistirá nun traballo experimental individual por parte do alumno dentro do grupo de investigación "síntese, simulación e espectroscopia" pertencente ao departamento Química Orgánica. A caracterización deste sistema levarase a cabo mediante as técnicas usuais de caracterización de moléculas orgánicas sinxelas, tales como UV-Vis, RMN de protón e carbono, espectrometría de masas e, para o composto enantiopuro, dicroísmo circular e rotación óptica.

Ao principio de cada semana planificarase conxuntamente o traballo a realizar e analizarase o traballo realizado co fin de optimizar tempo e recursos.

O alumno tamén asistirá e participará nas reunións de grupo semanais que se desenvolven en inglés na que todos os membros expoñen resultados de investigación e bibliografía.

**Plan de traballo:**

1. Busqueda bibliográfica de compostos sencillos con quiralidade axial. Caso particular do ácido de Fecht.
2. Síntese de ( $\pm$ ) ácido de Fecht a partir de compuestos comercialmente disponibles. Resolución quiral
3. Caracterización espectroscópica por RMN ( $^{13}\text{C}$  e  $^1\text{H}$ ), IR, MS (HRMS), UV-Vis e dicroísmo circular (CD).
4. Elaboración dun informe final que inclúa a análise dos resultados e conclusións para unha defensa pública.

Lugar onde se realizará o traballo:

Citexvi, planta -1, laboratorio S<sup>3</sup>

A presente solicitude establece o compromiso por parte do/s titor/es de dispoñer dos medios materiais necesarios para a realización do traballo proposto.

Vigo, 19... de outubro... de 2015... Vigo, 19... de outubro... de 2015 Vigo, ..... de ..... de

Sinatura do estudante

Sinatura do titor

Sinatura do cotitor

COMISION DO TRABALLO DE FIN DE GRAO



19 OCT. 2015

Campus de Vigo  
36310 Vigo  
España

Tel. 986 812 550  
Fax 986 812 556

quimica.uvigo.es  
decanatoquimica@uvigo.es

ENTRADA Nº 134

**FORMULARIO DE PROPOSTA DE TRABALLO FIN DE GRAO**  
**TIPO B: PROPOSTO POR UN ESTUDANTE E AVALADO POR DOCENTES**

**CURSO: 2015 / 2016**

**Título:**

**Sistemas de liberación de medicamentos basados en polímeros metaloorgánicos**

**Nome e apelidos do estudante que fai a proposta:**

Olaya Gómez Paz

**Titor que avala a proposta de Trabajo Fin de Grao:**

Nome e apelidos do titor: Ezequiel M. Vázquez López

Departamento: Química Inorgánica

**Cotitor do Trabajo Fin de Grao (de selo caso):**

Nome e apelidos do titor: Ana Belén Lago Blanco

Departamento: Química Inorgánica

**Breve descripción do contido do Trabajo Fin de Grao, indicando de forma concisa a metodoloxía e o plan de traballo:**

No presente proxecto se estudará o uso de polímeros de coordinación baseados en ligandos ponte N,N'-dadores e cinc para a obtención de materiais que portando moléculas con actividade farmacolóxica relevante (ibuprofeno e/o L-tirosina) permitan unha liberación lenta ou controlada por un estímulo (p.e. pH, concentración de cloruro, etc). Tendo en conta que o proceso de liberación e solubilidade do medicamento é afectado polo tamaño da partícula no material, se explorarán diferentes metodoloxías sintéticas que permitan exercer control sobre o tamaño do cristal e a súa distribución ó mesmo tempo que tamén como este (unha vez caracterizado) afecta ó mecanismo de liberación do medicamento. Por tanto se establece o seguinte plan de traballo: 1º) Deseño e síntese do polímero de coordinación e avaliación da posibilidade de incorporación do medicamento nesta primeira etapa. Caracterización estrutural o mais completa posible do material. 2º) De ser o caso, deseño do sistema de carga do medicamento no polímero. 3º) Estudo da capacidade de liberación do medicamento fronte a medios biolóxicos (PBS, soro salino). 4º) Establecemento de relacións entre o tamaño do cristal e liberación do medicamento.

**Lugar onde se realizará o traballo:**

Laboratorio 9 (Grupo Q15) Departamento de Q. Inorgánica, Facultade de Química

A presente solicitude establece o compromiso por parte do/s titor/es de dispoñer dos medios materiais necesarios para a realización do traballo proposto.

Vigo, 19 de Outubro de 2015.

Sinatura do estudante

Vigo, 19 de Outubro de 2015.

Sinatura do titor

Vigo, 19 de Outubro de 2015.

Sinatura do cotitor

**COMISION DO TRABALLO DE FIN DE GRAO**



**FORMULARIO DE PROPOSTA DE TRABALLO FIN DE GRAO  
TIPO B: PROPOSTO POR UN ESTUDANTE E AVALADO POR DOCENTES**

ENTRADA N.º 236  
CURSO: 2015 / 2016

**Título:**

Obtención de ferroflúidos con condutividade eléctrica

**Nome e apelidos do estudante que fai a proposta:**

Arturo Vacas Portomeñe

**Titor que avala a proposta de Traballo Fin de Grao:**

Nome e apelidos do titor: Moisés Pérez Lorenzo

Departamento: Química Física

**Cotitor do Traballo Fin de Grao (de selo caso):**

Nome e apelidos do titor:

Departamento:

**Breve descrición do contido do Traballo Fin de Grao, indicando de forma concisa a metodoloxía e o plan de traballo:**

Neste traballo tratarase de obter flúidos magnéticos que se comporten como un ferroflúido na presenza dun campo magnético externo e que ao mesmo tempo presenten condutividade eléctrica. Con este fin, sintetizaranse nanopartículas superparamagnéticas de óxidos de ferro e cobalto que serán incorporadas a unha dispersión de nanotubos de carbono (CNTs) como material conductor. Así, estudaranse as propiedades eléctricas das dispersións obtidas con diferentes concentracións de CNTs e nanopartículas magnéticas (MNPs).

**Plan de traballo:**

- \* Síntese de nanopartículas de óxidos de ferro e cobalto (mediante o método de coprecipitación)
- \* Obtención de dispersións de CNTs
- \* Estudo da condutividade eléctrica das mesturas con diferentes concentracións de CNTs e MNPs

**Lugar onde se realizará o traballo:**

Facultade de Química, 2º Andar - Laboratorio 3

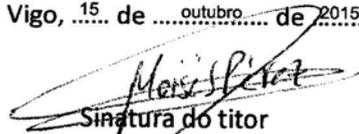
A presente solicitude establece o compromiso por parte do/s titor/es de dispoñer dos medios materiais necesarios para a realización do traballo proposto.

Vigo, 15 de outubro de 2015

Vigo, 15 de outubro de 2015

Vigo, ..... de ..... de .....

  
Sinatura do estudante

  
Sinatura do titor

Sinatura do cotitor

**COMISION DO TRABALLO DE FIN DE GRAO**

FORMULARIO DE PROPOSTA DE TRABALLO FIN DE GRAO  
TIPO B: PROPOSTOPOR UN ESTUDANTE E AVALADOPOR DOCENTES

CURSO: 2015/2016

ENTRADA Nº 237

Título:

**Síntesis de oxaciclos quirales, como precursores de productos naturales potencialmente activos**

Nome e apelidos do estudante que fai a proposta:

Jéssica CANO RIBERA

Titor que avala a proposta de Traballo Fin de Grao:

Nome e apelidos do titor: Yagamare FALL DIOP

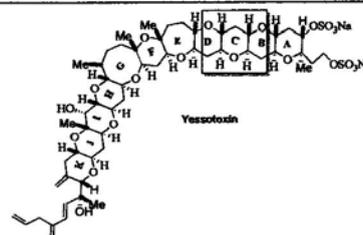
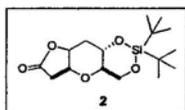
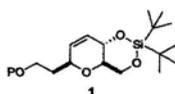
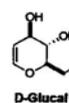
Departamento: Química Orgánica

Cotitor do Traballo Fin de Grao (de selo caso):

Nome e apelidos do titor: M<sup>a</sup> Generosa GÓMEZ PACIOS

Departamento: Química Orgánica

Breve descripción do contido do Traballo Fin de Grao, indicando de forma concisa a metodoloxía e o plan de traballo:



En este traballo se pretende utilizar la transposición de Claisen como herramienta sintética en la obtención de diversos productos naturales. En este contexto a partir del D-glucal, a través del compuesto 1, mediante una reacción de halolactonización se podría acceder al oxaciclo quiral 2, posible precursor de la toxina marina Yessotoxina. El alumno podrá familiarizarse con técnicas habituales en síntesis orgánica tales como: manejo de disolventes secos, trabajo en atmosfera inerte, aislamiento y purificación de los compuestos obtenidos, mediante técnicas cromatográficas. Finalmente la caracterización de las estructuras se llevará a cabo por espectroscopía de RMN, IR y masas, y en su caso por difracción de rayos X

Lugar onde se realizará o traballo:

Laboratorio de investigación nº 4 del Departamento de Química Orgánica

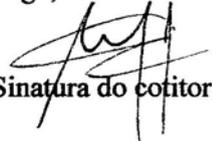
A presente solicitude establece o compromiso por parte do/s titor/es de dispoñer dos medios materiais necesarios para a realización do traballo proposto.

Vigo, 09 de Octubre de 2015

Vigo, 09 de Octubre de 2014

  
Sinatura do estudante

  
Sinatura do titor

  
Sinatura do cotitor

COMISION DO TRABALLO DE FIN DE GRAO



**FORMULARIO DE PROPOSTA DE TRABALLO FIN DE GRAO  
TIPO B: PROPOSTOPOR UN ESTUDANTE E AVALADOPOR DOCENTES**

20 OCT, 2015  
CURSO:2015/2016

ENTRADA Nº 238

**Título:**

**Aproximación a la síntesis de análogos de vitamina D<sub>2</sub>**

**Nome e apelidos do estudante que fai a proposta:**

Javier SANCHO PEREIRO

**Titor que avala a proposta de Traballo Fin de Grao:**

Nome e apelidos do titor: M<sup>re</sup> Generosa GÓMEZ PACIOS

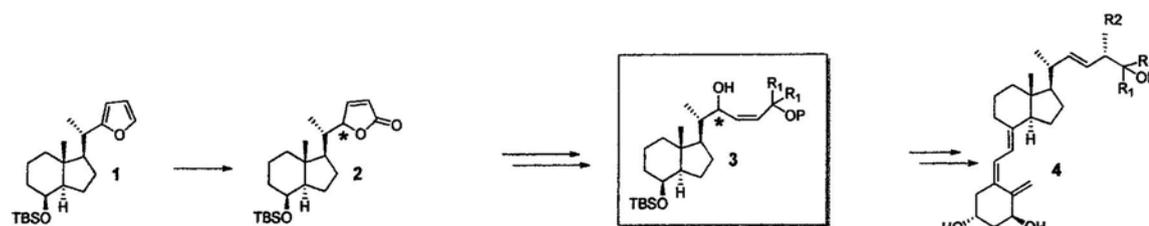
Departamento: Química Orgánica

**Cotitor do Traballo Fin de Grao (de selo caso):**

Nome e apelidos do titor: Yagamare FALL DIOP

Departamento: Química Orgánica

**Breve descripción do contido do Traballo Fin de Grao, indicando de forma concisa a metodoloxía e o plan de traballo:**



Se propone la síntesis del butenolido 2 a partir del furano 1 utilizando una metodología desarrollada en nuestro grupo de investigación. El furano 1 se obtendría a partir del diol de Inhoffen fácilmente asequible por ozonolisis reductora de la vitamina D<sub>2</sub>. El compuesto 2 conduce al alcohol alílico 3 precursor de análogos (4) de la vitamina D<sub>2</sub> por medio de una transposición de los correspondientes carbamatos. El alumno podrá familiarizarse con técnicas habituales en síntesis orgánica tales como: manejo de disolventes secos, trabajo en atmosfera inerte, aislamiento y purificación de los compuestos obtenidos, mediante técnicas cromatográficas. Finalmente la caracterización de las estructuras se llevará a cabo por espectroscopía de RMN, IR y masas, y en su caso por difracción de rayos X

**Lugar onde se realizará o traballo:**

Laboratorio de investigación nº 4 del Departamento de Química Orgánica

A presente solicitude establece o compromiso por parte do/s titor/es de dispoñer dos medios materiais necesarios para a realización do traballo proposto.

Vigo, 03 de Octubre de 2015

Vigo, 09 de Octubre de 2015

Vigo, 09 de Octubre de 2015

Sinatura do estudante

Sinatura do titor

Sinatura do cotitor

**COMISION DO TRABALLO DE FIN DE GRAO**

21 OCT. 2015

**FORMULARIO DE PROPOSTA DE TRABALLO FIN DE GRAO  
TIPO B: PROPOSTO POR UN ESTUDANTE E AVALADO POR DOCENTES**

ENTRADA EN: CURSO: 2015 / 2016 256

**Título:**

Reactividad de compuestos "half sandwich" de Ru(II) con alquinos y alquinoles propargílicos.

**Nome e apelidos do estudante que fai a proposta:**

Natalia Abelenda Campoamor

**Titor que avala a proposta de Traballo Fin de Grao:**

Nome e apelidos do titor: Soledad García Fontán

Departamento: Química Inorgánica

**Cotitor do Traballo Fin de Grao (de selo caso):**

Nome e apelidos do titor: Jorge Bravo Bernárdez

Departamento: Química Inorgánica

**Breve descripción do contido do Traballo Fin de Grao, indicando de forma concisa a metodoloxía e o plan de traballo:**

Los derivados organometálicos de Ru(II) son de gran interés debido a su utilización en síntesis orgánica, tanto en procesos catalíticos como estequiométricos.  
En el presente trabajo se propone la síntesis y reactividad de complejos de Ru(II) con diferentes sustratos orgánicos, tipo alquinoles y alquinos. Los complejos precursores de Ru(II) tendrán como ligandos soporte el indenilo (C<sub>9</sub>H<sub>7</sub>) o el Cp\*. Los complejos incorporarán además el ligando bidentado (Ph<sub>2</sub>POCH(Ph)CH(Ph)OPPh<sub>2</sub>) que posee un carácter π aceptor intermedio entre los ligando fosfina y CO. Para ello se propone el siguiente plan de trabajo:  
Síntesis de los complejos [Ru(C<sub>9</sub>H<sub>7</sub>)Cl(P-P)]/[RuCp\*Cl(P-P)]  
Reactividad del [Ru(C<sub>9</sub>H<sub>7</sub>)Cl(P-P)]/[RuCp\*Cl(P-P)] con alquinos y alcoholes propargílicos.  
La preparación de los productos de partida, así como la de los derivados alenilideno que se obtendrán requerirán la utilización de técnicas de trabajo en atmosfera inerte. La caracterización de los compuestos se llevará a cabo por RMN (1H, 31P, 13C), IR, espectrometría de masas y, cuando sea posible, por técnicas de difracción de rayos-X.

**Lugar onde se realizará o traballo:**

Laboratorio nº7, planta 3ª

A presente solicitude establece o compromiso por parte do/s titor/es de dispoñer dos medios materiais necesarios para a realización do traballo proposto.

Vigo, .21.. de .....Octubre..... de .2015.

Sinatura do estudante

Vigo, .21. de .....Octubre..... de .2015.

Sinatura do titor

Vigo, .24. de .....Octubre..... de 2015

Sinatura do cotitor



**FORMULARIO DE PROPOSTA DE TRABALLO FIN DE GRAO  
TIPO B: PROPOSTO POR UN ESTUDANTE E AVALADO POR DOCENTES**

CURSO: 2015 / 2016

ENTRADA N.º 258

**Título:**

Estudio estructural de complejos paramagnéticos de iones lantánidos con un ligando macrocíclico funcionalizado.

**Nome e apelidos do estudante que fai a proposta:**

Alexandre Santomé Costa

**Titor que avala a proposta de Traballo Fin de Grao:**

Nome e apelidos do titor: Paulo Pérez Lourido

Departamento: Química Inorgánica

**Cotitor do Traballo Fin de Grao (de selo caso):**

Nome e apelidos do titor: Laura Valencia Matarranz

Departamento: Química Inorgánica

**Breve descripción do contido do Traballo Fin de Grao, indicando de forma concisa a metodoloxía e o plan de traballo:**

En un primer lugar se realizará la síntesis y caracterización del ligando macrocíclico, lo cual requiere llevar a cabo diferentes reacciones químicas, que incluyen tanto la obtención de los precursores como la reacción de macrociclación. Posteriormente, se llevará a cabo la funcionalización del ligando macrocíclico y la obtención, a partir del mismo, de los correspondientes complejos paramagnéticos de iones lantánidos. Se pretende estudiar la estructura de estos complejos tanto en disolución como en estado sólido, utilizando para ello diferentes técnicas que incluyen espectroscopía IR, espectroscopía UV-vis, RMN, estudios fotofísicos, difracción de rayos X de monocristal, etc.

**Lugar onde se realizará o traballo:**

Laboratorio 8 del Dpto. Química Inorgánica, Planta 3ª de la Facultad de Química

A presente solicitude establece o compromiso por parte do/s titor/es de dispoñer dos medios materiais necesarios para a realización do traballo proposto.

Vigo, 21 de Octubre de 2015

Sinatura do estudante

Vigo, 21 de Octubre de 2015

Sinatura do titor

Vigo, 21 de Octubre de 2015

Sinatura do cotitor



ENTRADA N.º

259

CURSO: 2015 / 2016

**FORMULARIO DE PROPOSTA DE TRABAJO FIN DE GRAO  
TIPO B: PROPOSTO POR UN ESTUDANTE E AVALADO POR DOCENTES**

**Título:**

Estudio computacional de mecanismos de reacciones catalizadas por ouro

**Nome e apelidos do estudante que fai a proposta:**

Iria Bolaño Losada

**Titor que avala a proposta de Trabajo Fin de Grao:**

Nome e apelidos do titor: Olalla Nieto Faza

Departamento: Química Orgánica

**Cotitor do Trabajo Fin de Grao (de selo caso):**

Nome e apelidos do titor: Marta Marín Luna

Departamento: Química Orgánica

**Breve descripción do contido do Trabajo Fin de Grao, indicando de forma concisa a metodoloxía e o plan de traballo:**

Neste proxecto pretendemos abordar computacionalmente o estudo da selectividade na ciclación de 1,3-dien-5-inos catalizada por Au(I). Trátase dunha reacción na que o catalizador actúa como ácido de Lewis, activando insaturacións fronte ao ataque dun nucleófilo interno. Experimentalmente, tense observado que en función da presenza ou non de metanol no medio, o produto da reacción é un benceno ou un ciclopentadieno.

O obxectivo deste traballo é explicar a orixe desta selectividade analizando os distintos camiños de reacción dispoñibles para o sistema e as condicións baixo as cales estes son competitivos ou non: tipo de substrato, presenza dun nucleófilo externo/disolvente (metanol), ligandos sobre o centro metálico, etc.

Para iso empregaremos as ferramentas da Química Computacional e a Modelización Molecular, fundamentalmente métodos baseados en DFT (teoría do funcional da densidade) para a optimización xeométrica de mínimos e estados de transición ó longo dos distintos camiños de reacción, e técnicas como NBO e/ou QTAIM para analizar ás funcións de onda resultantes e obter información detallada sobre os tipos de enlace e interaccións que inflúen sobre as barreiras de reacción e a selectividade.

No grupo de acollida teñen acceso ós investigadores que describiron orixinalmente esta reactividade, polo que se prevé que exista unha retroalimentación enriquecedora entre o traballo computacional e os resultados experimentais.

**Lugar onde se realizará o traballo:**

Facultade de Química

A presente solicitude establece o compromiso por parte do/s titor/es de dispoñer dos medios materiais necesarios para a realización do traballo proposto.

Vigo, 20 de Outubro de 2015.

Sinatura do estudante

Vigo, 20 de Outubro de 2015.

Sinatura do titor

Vigo, 20 de Outubro de 2015.

Sinatura do cotitor

CURSO: 15 / 16 21 OCT 2015

ENTRADA N.º 263

**FORMULARIO DE PROPOSTA DE TRABALLO FIN DE GRAO  
TIPO B: PROPOSTO POR UN ESTUDANTE E AVALADO POR DOCENTES**

**Título:**

Descripción teórica de hidratos de clorofluorocarbonos (CFCs) utilizando Teoría Funcional de la Densidad (DFT)

**Nome e apelidos do estudante que fai a proposta:**

Ángel Manuel Fernández Fernández

**Titor que avala a proposta de Traballo Fin de Grao:**

Nome e apelidos do titor: Manuel Martínez Piñeiro

Departamento: Física Aplicada

**Cotitor do Traballo Fin de Grao (de selo caso):**

Nome e apelidos do titor: Martín Pérez Rodríguez

Departamento: Física Aplicada

**Breve descripción do contido do Traballo Fin de Grao, indicando de forma concisa a metodoloxía e o plan de traballo:**

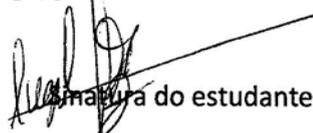
Los hidratos de gas son sólidos de inclusión no estequiométricos en los que, a bajas temperaturas y a presiones moderadamente altas, se forman estructuras con cavidades capaces de albergar pequeñas moléculas en su interior. Este tipo de compuestos presenta un notable interés para la comunidad científica debido a su excepcional capacidad de capturar diferentes tipos de gases contaminantes en su estructura. En el presente Trabajo de Fin de Grado se propone el estudio computacional de hidratos de gas tipo I teniendo como moléculas invitadas CFCs, empleando cálculos mecanocuánticos. Para la modelización a nivel microscópico se partirá de la estructura construida a partir de datos de difracción de rayos-X y neutrones. Existe controversia en la literatura científica acerca de si es posible que exista difusión interna a través de su estructura y de cuáles son los mecanismos implicados. Para profundizar en este tema y modelar las propiedades de transporte, se partirá del estudio de la red del hidrato como una entidad rígida (usada como modelo de referencia), evolucionando el estudio mediante el uso de celdas semiflexibles. Con este modelo, se estudiarán: los posibles mecanismos de transporte, a través de qué cara poliédrica suceden, las energías de transición en el transporte y la estabilidad global de la red, entre otras propiedades, basándose en cálculos ab-initio, y apoyándose en el análisis espectroscópico y topológico. El análisis topológico se obtendrá de la teoría QTAIM. Los cálculos asociados a este trabajo se realizarán en los servidores del Centro de Supercomputación de Galicia.

**Lugar onde se realizará o traballo:**

Departamento Física Aplicada, Facultade de Ciencias, Bloque C

A presente solicitude establece o compromiso por parte do/s titor/es de dispoñer dos medios materiais necesarios para a realización do traballo proposto.

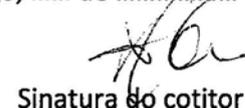
Vigo, 20 de OCTUBRE de 2015

  
Sinatura do estudante

Vigo, 20 de OCTUBRE de 2015

  
Sinatura do titor

Vigo, 20 de OCTUBRE de 2015

  
Sinatura do cotitor

COMISION DO TRABALLO DE FIN DE GRAO



**FORMULARIO DE PROPOSTA DE TRABALLO FIN DE GRAO**  
**TIPO B: PROPOSTO POR UN ESTUDANTE E AVALADO POR DOCENTES**

CURSO: 2015 / 2016 OCT. 2015

ENTRADA N.º 2.75

**Título:**

Desarrollo de métodos cromatográficos para el análisis de toxinas de ciguatera en pescados

**Nome e apelidos do estudante que fai a proposta:**

Dña. Catia Paz Portela

**Titor que avala a proposta de Traballo Fin de Grao:**

Nome e apelidos do titor: Dra. Ana Gago Martínez

Departamento: Química Analítica y Alimentaria

**Cotitor do Traballo Fin de Grao (de selo caso):**

Nome e apelidos do titor: Dr. José Manuel Leao Martins

Departamento: Química Analítica y Alimentaria

**Breve descripción do contido do Traballo Fin de Grao, indicando de forma concisa a metodoloxía e o plan de traballo:**

La intoxicación alimentaria del tipo Ciguatera se debe a la ingestión de pescado contaminado con biotoxinas de origen natural producidas por organismos fitoplanctónicos del género Gambierdiscus y denominadas ciguatoxinas. La reciente emergencia de las citadas biotoxinas en zonas costeras de la Unión Europea con climas cálidos, como es el caso de Canaria, Madeira y otras zonas del Mediterráneo ha hecho que la Unión Europea incida sobre la necesidad de controlar este tipo de riesgo en alimentos de origen marino, en especial en tipos de pescado de grandes tamaños. La cromatografía de líquido de alta eficacia acoplada a la Espectrometría de masas se considera la técnica analítica adecuada para la determinación de este tipo de biotoxinas, siendo la etapa de preparación de muestra la más crítica, debido a la complejidad de la matriz lipídica en la que este compuesto orgánico se encuentra presente. El objetivo de este trabajo se centrará por tanto en el desarrollo de un protocolo de pretratamiento de muestra que permita la extracción eficaz del analito de la matriz así como de las interferencias coextraídas de la misma, para ello se aplicarán técnicas de extracción en fase sólida utilizando diversos mecanismos los cuales serán evaluados mediante estudios de recuperación. Los resultados que esperados del desarrollo de este TFG es un protocolo de preparación de muestra optimizado y evaluado que contribuya a la eficacia del posterior análisis mediante Cromatografía de líquido con detección por espectrometría de masas.

**Lugar onde se realizará o traballo:**

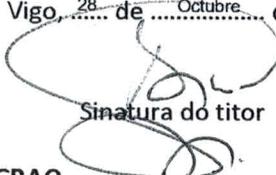
Lab. Investigación de Química Analítica, Fac. Química, Lab. 9 ,P.2 (resp. Ana Gago Martinez)

A presente solicitude establece o compromiso por parte do/s titor/es de dispoñer dos medios materiais necesarios para a realización do traballo proposto.

Vigo, 28 de Octubre de 2015

  
Sinatura do estudante

Vigo, 28 de Octubre de 2015

  
Sinatura do titor

Vigo, 28 de Octubre de 2015

  
Sinatura do cotitor

COMISION DO TRABALLO DE FIN DE GRAO



13 OCT. 2015

**FORMULARIO DE PROPOSTA DE TRABALLO FIN DE GRAO  
TIPO B: PROPOSTO POR UN ESTUDANTE E AVALADO POR DOCENTES**

CURSO: 2015 / 2016

ENTRADA N.º

332

**Título:**

Distribution of antioxidants in model food emulsions

**Nome e apelidos do estudante que fai a proposta:**

Olga Mitrus

**Titor que avala a proposta de Traballo Fin de Grao:**

Nome e apelidos do titor: Carlos Bravo Díaz

Departamento: Química Física

**Cotitor do Traballo Fin de Grao (de selo caso):**

Nome e apelidos do titor: Sonia Losada Barreiro

Departamento: Química Física

**Breve descripción do contido do Traballo Fin de Grao, indicando de forma concisa a metodoloxía e o plan de traballo:**

The proposed experiments involve the use of a kinetic methodology to analyze the effects of surfactant concentration on the distribution of antioxidants between the aqueous, interfacial and oil regions of model food emulsions. Kinetic results are interpreted on the basis of the pseudophase model and will permit to discard prepared with edible oils. The effects of other parameters electrolytes will also be assessed if time permitting.

**Lugar onde se realizará o traballo:**

Departamento de Química Física, Laboratorio 5, Planta 2

A presente solicitude establece o compromiso por parte do/s titor/es de dispoñer dos medios materiais necesarios para a realización do traballo proposto.

Vigo, 15 de October de 2015.

Vigo, 15 de October de 2015.

Vigo, 15 de October de 2015.

Mitrus Olga  
Sinatura do estudante

Sinatura do titor

Sinatura do cotitor

COMISION DO TRABALLO DE FIN DE GRAO



13 OCT, 2015

**FORMULARIO DE PROPOSTA DE TRABALLO FIN DE GRAO  
TIPO B: PROPOSTO POR UN ESTUDANTE E AVALADO POR DOCENTES**

CURSO 2015 / 2016 123

**Título:**

Transfer of antioxidants at the interfaces of model food emulsions

**Nome e apelidos do estudante que fai a proposta:**

Malgorzata Zuraw

**Titor que avala a proposta de Traballo Fin de Grao:**

Nome e apelidos do titor: Carlos Bravo Díaz

Departamento: Química Física

**Cotitor do Traballo Fin de Grao (de selo caso):**

Nome e apelidos do titor: Sonia Losada Barreiro

Departamento: Química Física

**Breve descripción do contido do Traballo Fin de Grao, indicando de forma concisa a metodoloxía e o plan de traballo:**

The proposed experiments involve the development of kinetic methodology to analyze the the transfer of antioxidants between the aqueous, interfacial and oil regions of model food emulsions prepared with edible oils. The effects of relevant parameters such as the surfactant concentration, acidity, micellar and macromolecular systems will also be assessed if time permitting.

**Lugar onde se realizará o traballo:**

Departamento de Química Física, Laboratorio 5, Planta 2

A presente solicitude establece o compromiso por parte do/s titor/es de dispoñer dos medios materiais necesarios para a realización do traballo proposto.

Vigo, 15 de October de 2015.

Sinatura do estudante

Vigo, 15 de October de 2015.

Sinatura do titor

Vigo, 15 de October de 2015.

Sinatura do cotitor

COMISION DO TRABALLO DE FIN DE GRAO

15 OCT. 2015

Campus de Vigo  
36310 Vigo  
España

Tel. 986 812 550  
Fax 986 812 556

quimica.uvigo.es  
decanatoquimica@uvigo.es

ENTRADA Nº 230

**FORMULARIO DE PROPOSTA DE TRABALLO FIN DE GRAO  
TIPO B: PROPOSTO POR UN ESTUDANTE E AVALADO POR DOCENTES**

CURSO: 2015 / 2016

**Título:**

Enhanced thermal and electric conducting nanofluids derived from functionalized graphene

**Nome e apelidos do estudante que fai a proposta:**

Ebtisam Tarek Mohammed Saeed

**Titor que avala a proposta de Traballo Fin de Grao:**

Nome e apelidos do titor: Manuel Martínez Piñeiro

Departamento: Física Aplicada

**Cotitor do Traballo Fin de Grao (de selo caso):**

Nome e apelidos do titor: María José Pastoriza Gallego

Departamento: Física Aplicada

**Breve descripción do contido do Traballo Fin de Grao, indicando de forma concisa a metodoloxía e o plan de traballo:**

The future of technological applications concerning Nanoscience and Nanotechnology lies in the precise control of surface characteristics and properties of nanoparticles, and graphene nanosheets offer a huge potential. Graphene has a high thermal conductivity and this makes it an attractive material for heat transfer applications. Functionalization is proposed because it is known that one problem related to graphene is that its high surface area nanosheets tend to form irreversible agglomerates or even re-stack to form graphite. In this work:

- 1) Commercial graphene nanosheets will be functionalized by the modified Hummers method, by obtaining graphene oxide nanosheets (GO). In the presence of strong oxidants, the aromatic carbon network is oxidized with the creation of hydroxyl, carboxyl and epoxy moieties. The oxidation level will be evaluated by thermogravimetry and X-ray photoelectron spectroscopy, while structural disorder induced by the covalent chemistry will be studied by Raman spectroscopy. The morphology of GO nanosheets will be analyzed by transmission electron microscopy (TEM) and scanning electron microscopy (SEM).
- 2) These graphene oxide nanosheets will be dispersed in a fluid base (EG, H<sub>2</sub>O) by ultrasonic bath, and the stability of these nanofluids will be studied by UV-Vis spectroscopy, under different conditions.
- 3) Physical properties (a) Electrical conductivity, b) Thermal conductivity and c) Rheological properties) of the selected stable nanofluids will be measured at different temperatures and concentrations.

**Lugar onde se realizará o traballo:**

Laboratorio de Física Aplicada, Fac de CC do Mar, 3ª planta

A presente solicitude establece o compromiso por parte do/s titor/es de dispoñer dos medios materiais necesarios para a realización do traballo proposto.

Vigo, 15 de October de 2015.

Vigo, 15 de October de 2015.

Vigo, 15 de October de 2015.

Sinatura do estudante

*Ebtisam Saeed*

COMISION DO TRABALLO DE FIN DE GRAO

Sinatura do titor

*Manuel Martínez Piñeiro*

Sinatura do cotitor

*María José Pastoriza Gallego*