



1. DATOS BÁSICOS DEL TFG:

Título: Inhibidores Covalentes a partir de Residuos Agrícolas y Forestales: Diseño y Síntesis

Descripción general (resumen y metodología):

El proyecto consiste en el desarrollo experimental de nuevos conocimientos obtenidos a partir de la investigación de estrategias sintéticas novedosas para la obtención de productos con un potencial marcado en el campo de salud. Se pretende aprovechar la amplia experiencia de nuestro grupo en síntesis de productos naturales para acceder a sustancias bioactivas, utilizando para ello una molécula de partida abundante en residuos agrícolas..

El diseño farmacológico moderno de nuevas drogas, basado en la prolongación de la respuesta terapéutica, ha crecido de forma vertiginosa en comparación con el diseño tradicional.[1]. Este nuevo enfoque se centra en la unión del fármaco con su diana mediante un enlace covalente, ya sea irreversible o reversible, lo cual se consideraba anteriormente poco viable debido al alto riesgo de toxicidad que puede suponer la formación de un enlace covalente entre el fármaco y su proteína diana [2]. Sin embargo, esta estrategia ha demostrado numerosas ventajas, como la reducción de la dosis del fármaco y la mejora del efecto terapéutica entre otras. Los productos naturales bioactivos continúan siendo la fuente de inspiración más importante para el descubrimiento de nuevos fármacos. Muchos de estos productos se unen a sus dianas biológicas mediante enlaces covalentes vía adición nucleofílica conjugada tipo Michael. Los derivados de productos naturales y sus análogos son de particular interés, en este sentido, destacan las cianoenonas terpénicas consideradas una nueva clase de agentes antiinflamatorios y citoprotectores, caracterizados por presentar una potente actividad [3]. Actualmente, algunos compuestos terpenoides o sus análogos se están ensayando en fase clínica II o III como nuevos fármacos covalentes [4]

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

Objetivos planteados:

El objetivo general del proyecto es la preparación de nuevos compuestos bioactivos y que poseen en sus estructuras un grupo carbonilo conjugado, a partir de ácidos terpénicos abundantes en residuos agrícolas y forestales.

como objetivo específico se acoplará un fragmento p-quinónico en el C-7 del dehidroabietato de metilo vía reacción de alquilación de Friedel-Crafts.

El desarrollo de compuestos terpénicos con anillos aromáticos es de gran interés tanto desde el punto de vista químico como aplicado. La estrategia basada en Acoplamiento de un fragmento quinónico o quinólico en estructuras terpénicas promete la obtención de moléculas con potenciales aplicaciones. El anillo quinónico proporciona mayor capacidad de interacción con el medio biológico a través de un enlace covalente ya sea irreversible o reversible, lo que puede incrementar sus propiedades biológicas

Bibliografía básica:

[1] RSC Med. Chem, **2021**,12, 1037- 1045, Future. Med. Chem., **2021**, 13, 193 - 210.

[2]] . Singh, J. Med. Chem. **2022**, 5886 - 5901

[3] T. Honda et. al. J. Med. Chem. **2011**, 54, 1762 -1778; J. Med. Chem. **2012**, 55, 4837 -4846; Scientific Report, **2018**, 8: 8037

[4]]. Singh, J. Med. Chem. **2022**, 65, 5886 - 5901; X. Lu., J. Med. Chem. **2022**, 65, 58 - 83) (

Recomendaciones y orientaciones para el estudiante:

Realizar bibliografía sobre ácido dehidroabiético y ´sus derivados

Plazas: 1

2. DATOS DEL TUTOR/A:

Nombre y apellidos: RACHID CHAHBOUN KARIMI

Ámbito de conocimiento/Departamento: QUÍMICA ORGÁNICA

Correo electrónico: rachid@ugr.es

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

Nombre y apellidos:

Ámbito de conocimiento/Departamento:

Correo electrónico:

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

Nombre y apellidos:

Correo electrónico:

Nombre de la empresa o institución:

Dirección postal:

Puesto del tutor en la empresa o institución:

Centro de convenio Externo:

5. DATOS DEL ESTUDIANTE:

Nombre y apellidos:

Correo electrónico: