



1. DATOS BÁSICOS DEL TFG:

Título: Sistemas moleculares multicomponente para la mejora de propiedades de fármacos. Síntesis y caracterización estructural de una sal molecular dual fármaco-fármaco (Asociado a Prácticas Externas)

Descripción general (resumen y metodología):

Resumen:

Los cocristales y en general los sistemas moleculares multicomponente son de interés tanto en el ámbito académico como el industrial ya que permiten desarrollar estrategias de ingeniería cristalina para el diseño de nuevos materiales y ofrecen una oportunidad para mejorar las propiedades de manufactura o de biodisponibilidad de fármacos. Además, representan una oportunidad de protección de la propiedad intelectual (en fármacos genéricos o aquellos cuya patente va a expirar pronto), pudiendo evitar infracciones de patentes sobre fármacos ya existentes.

Metodología:

- Búsqueda bibliográfica de las formas sólidas multicomponente reportadas de los fármacos antibacteriano y antiinflamatorio modelos propuestos.
- Búsqueda de las estructuras cristalinas reportadas en la base de datos CSD. Síntesis en solución y en estado sólido de los sistemas seleccionados.
- Estudio de propiedades físico-químicas (caracterización estructural mediante DSC / TGA, FT-IR, difracción de rayos X de polvo y monocristal).
- Evaluación de solubilidad.

Tipología: Trabajos experimentales, de toma de datos de campo o de laboratorio.

Objetivos planteados:

- Síntesis de sistemas moleculares multicomponente (sales y cocristales, incluyendo sus posibles hidratos o solvatos) con potencial actividad farmacológica.
- Caracterización estructural mediante técnicas difractométricas, térmicas y espectrales de las nuevas formas sólidas obtenidas.

Bibliografía básica:

- Panzade, P.; Wagh, A.; Harale, P.; Bhilwade, S. Pharmaceutical Cocrystals: A Rising Star in Drug Delivery Applications. J. Drug Target 2024, 32 (2), 115– 127, DOI: 10.1080/1061186X.2023.2300690
- Duggirala, N. K.; Perry, M. L.; Almarsson, Ö.; Zaworotko, M. J. Pharmaceutical Cocrystals: Along the Path to Improved Medicines. Chem. Commun. 2016, 52 (4), 640– 655, DOI: 10.1039/C5CC08216A
- Bolla, G.; Sarma, B.; Nangia, A. K. Crystal Engineering of Pharmaceutical Cocrystals in the Discovery and Development of Improved Drugs. Chem. Rev. 2022, 122 (13), 11514– 11603, DOI: 10.1021/acs.chemrev.1c00987

Recomendaciones y orientaciones para el estudiante:

Es obligatorio estar matriculado en el curso 2025/2026 en la asignatura de Prácticas Externas para solicitarlo.

Plazas: 1

2. DATOS DEL TUTOR/A:

Nombre y apellidos: ÓSCAR BALLESTEROS GARCÍA

Ámbito de conocimiento/Departamento: QUÍMICA ANALÍTICA

Correo electrónico: oballest@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: Duane Choquesillo-Lazarte

Correo electrónico: duane.choquesillo@csic.es

Nombre de la empresa o institución: Instituto Andaluz de Ciencias de la Tierra-CSIC

Dirección postal: Avda. de las Palmeras 4 18100 - Armilla (Granada)

Puesto del tutor en la empresa o institución: Científico titular

Centro de convenio Externo: Instituto Andaluz de Ciencias de la Tierra-CSIC

5. DATOS DEL ESTUDIANTE:

Nombre y apellidos:

Correo electrónico: