



1. DATOS BÁSICOS DEL TFG:

Título: Diseño y Desarrollo de Bloques de Construcción Estratégicos para Máquinas Moleculares

Descripción general (resumen y metodología):

Este proyecto se enmarca en una de las líneas de investigación del grupo dedicada al desarrollo de máquinas y/o dispositivos moleculares funcionales. Este tipo de estructuras han tenido un gran desarrollo en las últimas décadas, reconocido con la concesión del premio Nobel en 2016. Los dispositivos moleculares son estructuras que presenta alguna propiedad útil para aplicaciones como sistemas fluorescentes, sensores, etc., mientras que en las máquinas moleculares el control del movimiento a nivel molecular se utiliza para desarrollar una función, dando lugar a un gran número de aplicaciones como catalizadores modulables, motores moleculares, sistemas con fluorescencia modulable, liberación controlada, transporte, entre otras.

En esta propuesta de TFG se introducirá al alumno/a en este campo de investigación de tal manera que se familiarice con las estructuras orgánicas empleadas en esta área y pueda iniciarse en la síntesis de diferentes intermedios necesarios para la construcción de este tipo de estructuras.

Las tareas a realizar por el alumno se encuadran dentro de la síntesis orgánica y la química supramolecular:

- Revisión bibliográfica de los elementos estructurales utilizados en el diseño de diferentes estructuras para los materiales funcionales.
- Síntesis de los diferentes “building blocks” o motivos estructurales orgánicos precursores.
- Caracterización de los diferentes compuestos mediante las técnicas habituales de síntesis orgánica: RMN de ^1H y ^{13}C , espectrometría de masas, espectroscopia de infrarrojo y UV-Vis.

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

Objetivos planteados:

El objetivo principal es la síntesis y caracterización de building blocks orgánicos, es decir, fragmentos estructurales clave que pueden servir como base para la construcción de sistemas moleculares complejos que deben presentar funciones avanzadas, en particular en el área de máquinas moleculares.

A lo largo del proyecto, el estudiante:

- **Se formará en técnicas fundamentales de síntesis orgánica**, abordando el diseño de rutas sintéticas, el manejo experimental y los métodos de purificación. Para ello se utilizarán las técnicas habituales en síntesis orgánica, entre otras, reacciones bajo atmósfera inerte, aislamiento mediante técnicas de separación (extracción líquido-líquido, filtración, etc..) y purificación mediante técnicas cromatográficas.
- **Aprenderá a utilizar herramientas esenciales de caracterización y determinación estructural**, como la espectroscopía de RMN (^1H y ^{13}C), la espectrometría de masas y técnicas cromatográficas.
- **Desarrollará competencias en diseño molecular y estrategia sintética**, incluyendo la selección de productos de partida, la conexión lógica de transformaciones químicas, la optimización de condiciones experimentales y la adaptación de rutas sintéticas en función de los resultados obtenidos. Comprenderá cómo la estructura de los building blocks puede llegar a influir en las propiedades y funciones de los sistemas moleculares contruidos a partir de ellos.

- **Se introducirá en la investigación en máquinas moleculares**, aprenderá a diseñar sistemas con comportamiento dinámico, como movimiento controlado, respuesta a estímulos o funciones mecánicas a escala molecular.
- **Explorará el concepto de modulación de propiedades quiroópticas**, es decir, la capacidad de ciertas moléculas para modificar su respuesta frente a la luz polarizada circular (CD, CPL) en función de cambios estructurales o frente a estímulos. Este fenómeno es de gran interés tanto fundamental como aplicado, ya que permite diseñar sensores, materiales fotónicos o dispositivos moleculares con respuesta en tiempo real y control externo.
- **Adquirirá habilidades propias del entorno investigador**, desde la planificación experimental hasta el análisis de resultados y la comunicación científica.

El proyecto ofrece una experiencia formativa sólida en Química Orgánica avanzada, estrechamente vinculada a un campo de investigación interdisciplinar en plena expansión.

Bibliografía básica:

- 1) S. Erbas-Cakmak, D. A. Leigh, C. T. McTernan, A. L. Nussbaumer, Artificial Molecular Machines, Chem. Rev. 2015, 115, 10081–10206
- 2) M. Xue, Y. Yang, X. Chi, X. Yan, F. Huang, Development of Pseudorotaxanes and Rotaxanes, Chem. Rev., 2015, 115, 7398

Recomendaciones y orientaciones para el estudiante:

- Se recomienda haber superado o estar cursando las asignaturas de Química Orgánica del grado.
- En la revisión bibliográfica se manejarán artículos científicos en inglés.

Plazas: 1

2. DATOS DEL TUTOR/A:

Nombre y apellidos: SARA PATRICIA MORCILLO MARTÍNEZ

Ámbito de conocimiento/Departamento: QUÍMICA ORGÁNICA

Correo electrónico: samorcillo@ugr.es

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

Nombre y apellidos: VÍCTOR BLANCO SUÁREZ

Ámbito de conocimiento/Departamento: QUÍMICA ORGÁNICA

Correo electrónico: victorblancos@ugr.es

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: