



UNIVERSIDAD DE EXTREMADURA
FACULTAD DE CIENCIAS

ANEXO 1 PROPUESTA DE TRABAJO FIN DE GRADO

**-DEPARTAMENTO DE LA UEX RESPONSABLE DE LA OFERTA:
QUÍMICA ORGÁNICA E INORGÁNICA**

-TÍTULO DEL TRABAJO:

Preparación de heterociclos mesoiónicos tionados precursores de nuevos materiales ópticos no lineales

- CARACTERÍSTICAS DEL TRABAJO FIN DE GRADO

-Tipo de trabajo (señalar con una cruz el que proceda):

Teórico		Revisión e investigación bibliográfica		Numérico	
Proyectos de ingeniería		Proyectos de diseño industrial		Informes	
Computacional	X	Experimental	X	Otros (especificar)	

-Descripción del trabajo (objetivos, metodología...)

El presente proyecto surge como consecuencia de las investigaciones realizadas por nuestro grupo durante los últimos años sobre la síntesis, caracterización y exploración de la reactividad de algunos tipos de heterociclos mesoiónicos.

Actualmente estamos interesados en extender el estudio de la estructura y reactividad molecular de los heterociclos mesoiónicos hacia el diseño y preparación de nuevos materiales, con propiedades ópticas no lineales, que puedan utilizarse en áreas tan importantes como la telecomunicación, almacenamiento y recuperación de datos, informática y tecnologías

relacionadas.

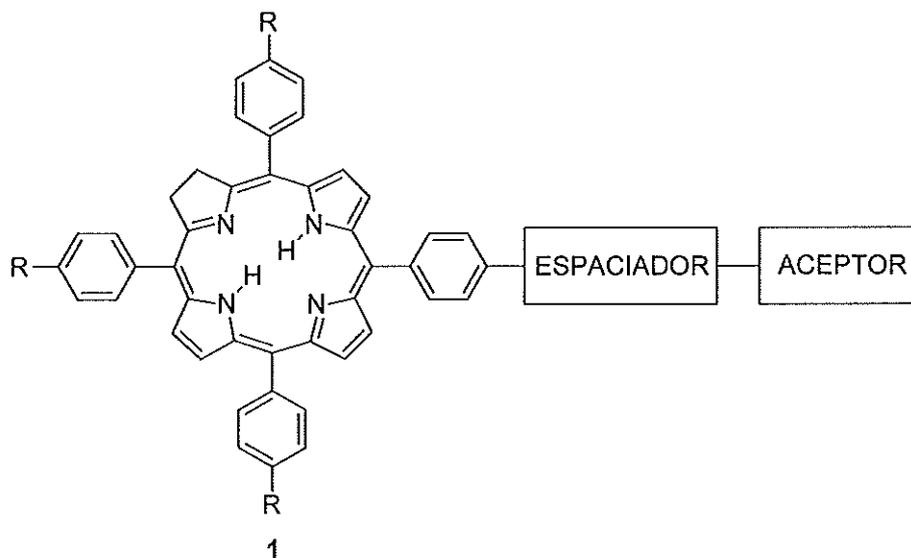
Los materiales con propiedades ópticas no lineales han sido tradicionalmente sólidos inorgánicos, pero desde hace unos años se están buscando con gran interés materiales orgánicos y organometálicos porque presentan mayor flexibilidad química (se pueden obtener a través de un mayor número de estrategias sintéticas y se pueden modificar fácilmente), mayor estabilidad y menor coste de fabricación.

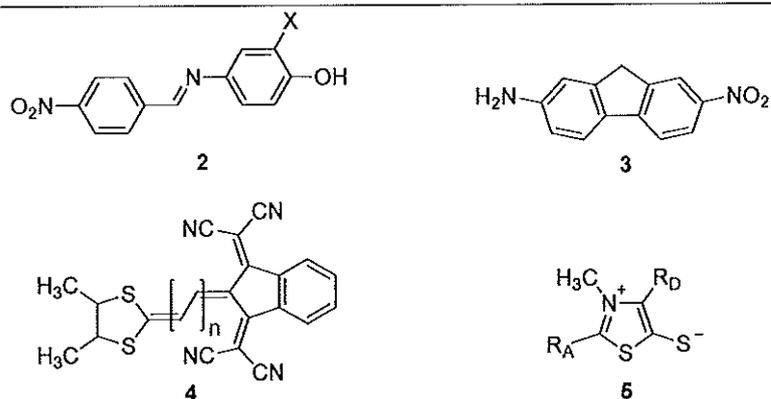
Desde un punto de vista práctico, se puede conseguir un sistema químico capaz de presentar propiedades ópticas no lineales conectando un grupo dador de electrones con un aceptor de electrones a través de un espaciador polarizable que posea un sistema conjugado de electrones π , una característica estructural que presentan los sistemas "push-pull" (Figura 1).



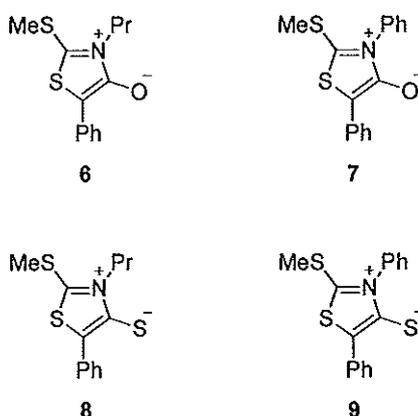
Figura 1

En la bibliografía se describe la preparación y caracterización de sistemas "push-pull" con propiedades ópticas no lineales, tales como porfirinas (1), bases de Schiff (2), fluorenos (3) y merocianinas (4). Asimismo, se ha constatado la absorción no lineal de un heterociclo mesoiónico, el 1,3-tiazolio-5-tiolato **5** (R_A = Grupo aceptor y R_D = Grupo dador).



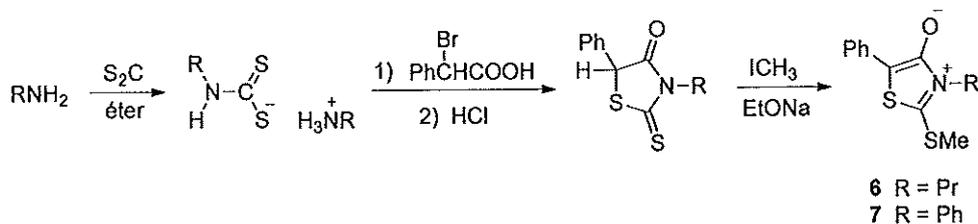


Por este motivo y, como continuación de nuestras investigaciones sobre la reactividad de las 2-aminotioisomünchnonas nos planteamos como primer objetivo sintetizar dos nuevos sistemas derivados del núcleo de 1,3-tiazolio-4-olato (**6** y **7**) que dispusieran de un grupo dador de electrones (S-CH₃) en la posición 2 del anillo, con objeto de evaluar su influencia sobre la reactividad y propiedades del sistema mesoiónico. En segundo lugar, nos proponemos estudiar la reactividad de los compuestos **6** y **7** frente a arilisotiocianatos, ya que esta reacción permite intercambiar el oxígeno exocíclico del material de partida por un azufre, constituyendo un procedimiento de tionación eficaz por el que podremos transformar los compuestos **6** y **7** en sus tioanálogos **8** y **9** con objeto de aumentar su estabilidad y, por ello, su capacidad para ser utilizados como materiales en la fabricación de dispositivos electrónicos.



La síntesis de los compuestos **6** y **7** puede llevarse a cabo mediante un proceso multietapa (Esquema 1) que se iniciaría con la preparación de un ditiocarbamato por reacción de una amina con disulfuro de carbono. La S-alkilación del ditiocarbamato con ácido α -bromofenilacético y posterior ciclación en medio ácido debería originar una 3-alkil(aril)-5-fenil-4-oxo-1,3-tiazolidin-2-tiona que, finalmente, podría alquilarse con yoduro de metilo en medio fuertemente básico para dar las correspondientes tioisomünchnonas **6** y **7**. El tratamiento

de estas 2-metiltioisomünchnonas con arilisotiocianatos permitirá obtener en la última etapa de la síntesis los compuestos tionados 8 y 9.



Esquema 1

La ejecución de este proyecto permitirá al estudiante iniciarse en un campo de gran interés, como es el diseño y síntesis de nuevas moléculas con propiedades ópticas no lineales, que exigirá que, paralelamente al trabajo experimental, se explore teóricamente la respuesta no lineal de las moléculas sintetizadas mediante el cálculo de sus hiperpolarizabilidades, para lo cual contamos con los recursos computacionales que ofrece el cluster de PCs del Departamento de Química Orgánica e Inorgánica y el supercomputador Lusitania ubicado en el Centro Extremeño de Investigación, Innovación Tecnológica y Supercomputación (Cénits) dependiente de la Junta de Extremadura.

Observaciones: Se oferta a los alumnos que cursan el Grado en Química

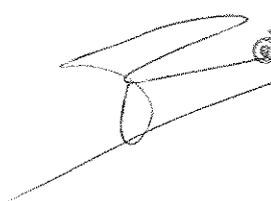
-TUTORES:

Nombre: José Luis Jiménez Requejo y Martín Ávalos González

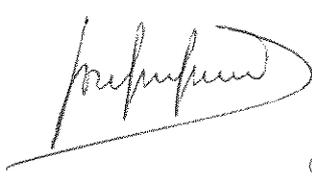
Área de conocimiento: Química Orgánica

Fecha de aprobación del Consejo del Departamento: 5. XI - 2012

Vº Bº y Firma del Director del Dpto


 FACULTAD DE CIENCIAS
 DEPARTAMENTO DE QUÍMICA
 ORGÁNICA E INORGÁNICA
 Campus Universitario
 Avenida de Elvas s/n
 06071-BADAJOS/ESPAÑA
 UNIVERSIDAD DE EXTREMADURA

Vº Bº y Firma de los Tutores



 Decanato de la Facultad de Ciencias