

Kimika Sintetiko eta Industrialak Masterra

Master Amaierako Lanak (MAL) eskaintza

24/25 ikasturtea

- Arabako Campusa
- Bizkaiko Campusa
- Gipuzkoako Campusa

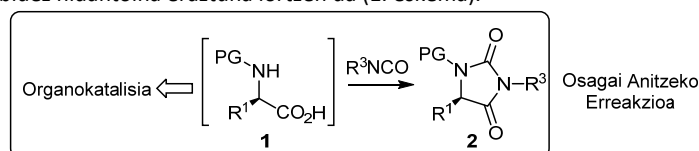
- Arabako Campusa

IZENBURUA: Hidantoina nukleoa duten molekula hibridoak diseinatzeko osagai anitzeko erreakzio enantioselektibo organokatalizatuak

LABURPENA

Polifarmakologiaren praktika kontzeptu berria ez bada ere, gaixotasun baten tratamendurako bi entitate bioaktibo edo gehiago administratzeko ikuspegiak eraldatu egin dira urteetan zehar. Polifarmakologiaren arloan molekula hibridoak (ligando anitzen ikuspegiak) erabilerak indarra hartu du azken urteetan, itxaropenekin anitz modulatzen diren molekula garatuz. Azken hamarkadetan, biologikoki esanguratsuen diren fragmentuen konbinazio bidez lortutako molekula hibridoak sintesia asko zabaldu da, hauen aktibitate farmakologikoaren ebaluazioarekin batera.¹ Hidantoina eratzuna duten konposatuak ezagunak farmakologiko apartak dituztela eta aktibitate-espektro zabala erakusten dutela ezaguna da. Literaturan, adibidez, minbiziaren, infekzio mikrobianoen, gaixotasun metabolikoen eta epilepsiaen aurka aktibitatea dutela deskribatu da.²

Hidantoina nukleoa (**2**) sintetizatzen den metodori sinpleenak bat Urech-Read erreakzioa da, non, α -aminoazido deribatu batek (**1**) isozianatoarekin erreakzionatzen duen urea bat lortzeko. Ondoren, ziklazio intramolekular baten bidez hidantoina eratzuna lortzen da (1. eskema).



1. Eskema. Helburu orokorra. *In situ* sortutako α -aminoazido deribatu en Urech-Read erreakzioa.

Hidantoina (**2**) deribatuak lortzeko osagai anitzeko metodologia oso eraginkorra isozianatoen presentzian **1** α -aminoazidoak *in situ* sortzea da. Osagai anitzeko estrategia hauetan hiru konposatu edo gehiagok aldi berean erreakzionatzen duten molekular berri bat sortzeko. Metodologia hauek balio handikoak dira kimika organikoan, izan ere, erreakzio sekuentzial klasikoekin alderatuta abantaila handiak erakusten dituzte.³

α -Aminoazidoen (**1**) jatorriaren arabera, entitate molekular desberdinetatik eratorritako hibridoak lortu daitezke. Zehazki, Farmazia Fakultateko (Vitoria-Gasteiz) "Síntesis Orgánica en Química Médica (OSMC)" ikerketa-taldeak modu arrakastatsuan erabili du estrategia hau γ -laktama deribatuak eta hidantoina-tetrahidrokinolina, fosfonato edo indol egiturak dituzten hibridoak prestatzeko.⁴

Protokolo sintetiko honen erabilgarritasuna zabaltzeko, **MAL honen helburu orokorra** osagai anitzeko erreakzio asimetriko berriak garatzea izango da. Lan honetan, α -aminoazido deribatu (**1**) berriak sortzeko dira erreakzio organokatalizatuen bidez, zeintzuk isozianatoen presentzian, hidantoina deribatu optikoki puruak (**2**) emango dituzte.

Bibliografia:

- 1) Shaveta, Mishra, S.; Singh, P. Hybrid molecules: The privileged scaffolds for various pharmaceuticals. *Eur J Med Chem.* **2016**, *124*, 500.
- 2) Cho, S.; Kim, S.-H.; Shin, D. Recent applications of hydantoin and thiohydantoin in medicinal Chemistry. *Eur J Med Chem.* **2019**, *164*, 517.
- 3) Zhu, J.; Wang, Q.; Wang, M.-X. (Eds.) *Multicomponent Reactions in Organic Synthesis*, Wiley-VCH, Weinheim, 2015.
- 4) MCR-ko taldearen lan batzuk: a) del Corte, X.; Maestro, A.; Vicario, J.; Martínez de Marigorta, E.; Palacios, F. Brønsted-Acid-Catalyzed Asymmetric Three-Component Reaction of Amines, Aldehydes, and Pyruvate Derivatives. Enantioselective Synthesis of Highly Functionalized γ -Lactam Derivatives. *Org. Lett.* **2018**, *20*, 317. b) del Corte, X.; López-Francés, A.; Maestro, A.; Martínez de Marigorta, E.; Palacios, F.; Vicario, J. Brønsted Acid Catalyzed Multicomponent Synthesis of Phosphorus and Fluorine-Derived γ -Lactam Derivatives. *J. Org. Chem.* **2020**, *85*, 14369. c) López-Francés, A.; del Corte, X.; Serna-Burgos, Z.; de los Santos, J. M.; de Cózar, A.; Vicario, J. Chiral Self-Recognition in a Bisperiocyclic Cyclodimerisation Reaction of 1-Azadienes. *Org. Chem. Front.* **2023**, *10*, 6103.

HIZKUNTZAK: GAZTELANIA/INGELES/A/EUSKARA

TOKIA: FARMAZIA FAKULTATEKO KIMIKA ORGANIKOA I SAILA (VITORIA-GASTEIZ).

IKERKETA TALDEA: SÍNTESIS ORGÁNICA EN QUÍMICA MÉDICA. (OSMC).

WEBGUNEA: <https://www.ehu.es/pfq>

POSTU KOPURUA: 2

ARDURADUNAK: JAVIER VICARIO, XABIER DEL CORTE.

POSTA ELEKTRONIKOA: javier.vicario@ehu.es / xabier.delcorte@ehu.es

IZENBURUA: Inhibitzaile entzimatikoen diseinu eta sintesia, eta haien jarduera biologikoaren analisia cancer, leishmania eta bakterioen aurkako agente gisa.

LABURPENA:

Gaixotasunak tratatzeko ikerketa/berrikuntza ekarpen garrantzitsua da gizartearen ongizaterako eta osasun-egoerarako. TFM honek konposatu heterozikliko berriak prestatzeko aukerak aztertuko ditu, batetik minbiziaren tratamendurako, herrialde garatuetan hilkortasunaren bigarren kausarik ohikoena, eta bestetik gaixotasun infekzioetarako, leishmaniasia kasu, batez ere garatu gabeko herrialdeetan eragin sozial handia duena.

Estrategia sintetikoaren artean zikloadizio erreakzioak daude, hala nola Povarov erreakzioan oinarritutakoak, sekuentzialak eta multikomponenteak, konposatu poliheteroziklikoen aukera zabala ahalbidetzen dutenak.

Ondoren, konposatu horien jarduera biologikoa aztertuko da, inhibitzaile entzimatikoen gisa, propietate antiugaltzaile eta antiinfekziosoak (antileishmanial eta antibakterioen kontra).

Ikasleek Kimika Organikoko Sintesiarekin batera beste arlo lotutako diziplina anitzeko trebetasunak garatuko dituzte. Horien artean daude sintesi-instrumentazioa maneiatzea (atmosfera giro eta inerte), purifikazio-teknikak, konposatu berriak zehazteko metodologiak egiturazko determinazioan oinarritutakoak (UV, IR, EM, NMR) eta biologia molekular eta zelularra, hala nola material genetikoaren zehazteko elektroforesia, diana molekular batekin inhibizio entzimatikoa egiteko entseguak, kultibo zelularra, mikroskopia optikoa, zelulen bideragarritasuna

HIZKUNTZA(K): Euskara, Gaztelania, Ingelesa

TOKIA: Farmazia Fakultatea, Lascaray Ikerketa Zentroa, Arabako Campusa

IKERKETA TALDEA: Sintesi Organikoa Medikuntza-Kimikan

WEBGUNEAK: www.ehu.es/eus/web/pfq/hasiera

POSTU KOPURUA: 2

ARDURADUNA: Concepción Alonso

HARREMANETARAKO POSTA ELEKTRONIKOA: concepcion.alonso@ehu.es

IZENBURUA: Aziridina deribatu berrien diseinua, sintesia eta erreaktibotasuna, eta beraien aktibitate antiproliferatiboa ikertzea

LABURPENA

Aziridinak hiru kideko sistema heterozikliko baliotsuenetako bat dira sintesi organikoan. Bitartekari sintetiko garrantzitsuak dira erregio eta estereoselektiboki ireki daitezkeelako. Hiru kideko aziridina eraztuna biologikoki aktiboak diren konposatu askotan ageri da, adibidez aziridina eraztuna duten konposatu askok aktibitate antitumoral edo antibiotikoa dute, eta beste asko entzima inhibitzaileak dira.

Proiektua metodologia sintetikoetan oinarritzen da, hala nola, prozesu organokatalizatuetan, diastereo edo enantioselektiboetan, baita osagai anitzeko erreakzioetan ere, honela besteak beste karbono-karbono eta karbono-nitrogeno lotura berriak eratuko dira. Egitura aziklikoa edo/eta ziklikoa eta nitrogenoa duten molekula hibrido berrien diseinu arrazional eta sintesian jarriko da arreta. Erronka horien arabera, proiektu honen helburuak hurrengoak izango dira:

1. Aziridina-nukleo bat duten molekula hibrido berrien diseinua eta sintesia 3CR-Joullié-Ugi prozesuak eta antzekoak erabiliz. 2*H*-azirinak 3-CR Joullié-Ugi erreakzioetan imina zikliko gisa erabiltzea.
2. Prozesu enantioselektibo organokatalizatuak aziridina asimétriko berriak sintetizatzen.
3. Konposatu azikliko eta heterozikliko ugari prestatzeko prozesuak orokortzea.
4. Konposatuen familien *in vitro* jarduera zitotoxikoaren ebaluazioa minbiziaren zenbait zelula-lerrotan.

HIZKUNTZA(K): gaztelania, ingelesa

TOKIA: Kimika Organikoa I Saila. Farmazia Fakultatea, UPV/EHU, (Vitoria-Gasteiz)

IKERKETA TALDEA: Sintesi Organikoa Kimika Medikoa (OSMC)

WEBGUNEA: <https://www.ehu.eus/eu/web/pfq/hasiera>

POSTU KOPURUA: 2

ARDURADUNA(K): Jesús M. de los Santos Ruiz, Ana M^a Ochoa de Retana Mendibil

HARREMANETARAKO POSTA ELEKTRONIKOA: jesus.delossantos@ehu.eus

IZENBURUA: New Highly Stable Organic Electroactive Compounds for Redox Flow Battery Application

LABURPENA:

Redox Flow Batteries (RFB) stand as prime candidates for grid energy storage that would enable Energy Transition based on renewables.¹ Beyond their unique modular design, the success of these batteries relies on the stability of the active materials that ensure battery lifetimes over 20 years. Organic compounds based on earth-abundant elements such as C, H, O, N, S dare the supremacy of widely explored but scarce inorganic active materials.² Moreover, the high tunability of those compounds by molecular engineering allows to control key aspects as (electro)chemical stability, redox potential and solubility.

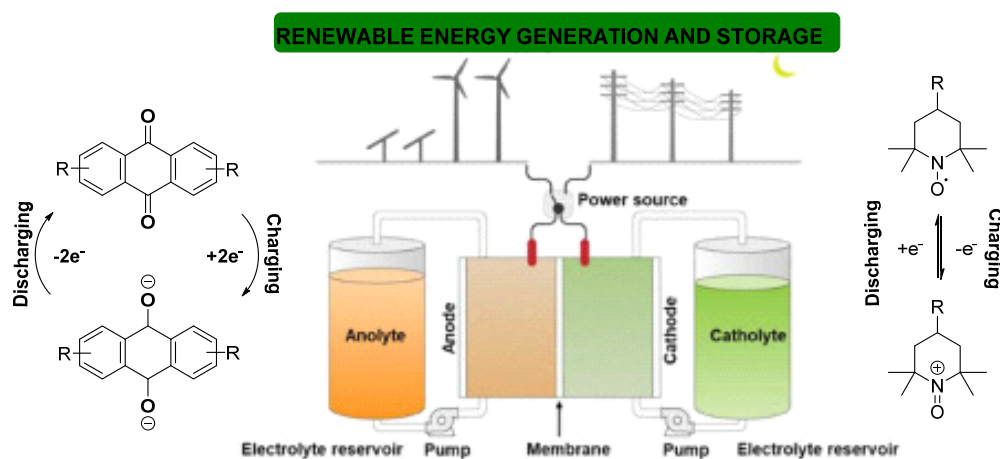


Figure 1. Schematic illustration of RFB; anthraquinones and TEMPO derivatives are depicted as examples of anolyte and catholyte, respectively.

The diverse range of available molecular structures (quinones, TEMPO, phenazines) motivates the search for new active materials and holds great promise to achieve an optimal battery. The main objective of this project will be to develop robust electroactive molecules suitable for their application on RFBs. Wise design to prevent classical degradation pathways will be applied based on the experience of our research group.

HIZKUNTZA(K):: English, Español, Euskera

TOKIA: CIC energiGUNE, Parque Tecnológico de Álava (Vitoria-Gasteiz)

IKERKETA TALDEA: Advanced Electrolytes and Cell Integration (EES)

WEBGUNEA: www.cicenergigune.com

POSTU KOPURUA: 1

ARDURADUNA: Eduardo Sánchez

HARREMANETARAKO POSTA ELEKTRONIKOA: esanchez@cicenergigune.com

¹ Sánchez-Díez, E.; Ventosa, E.; Guarnieri, M.; Trovò, A.; Flox, C.; Mancilla, R.; Soav, F.; Mazur, P.; Aranzabe, E.; Ferret, R. *J. Power Sources* **2021**, *481*, 228804.

² a) Huskinson, B.; Marshak, M.P.; Suh, C.; Er, S.; Gerhardt, M.R.; Galvin, C.J.; Chen, X.; Aspuru-Guzik, A.; Gordon, R.G.; Aziz, M.J. *Nature* **2014**, *505*, 195-198. b) Luo, J.; Hu, B.; Debruler, C.; Liu, T.L. *Angew. Chem., Int. Ed.* **2018**, *57*, 231-235.

IZENBURUA: Design and Synthesis of Fluorine-free Salts for More Sustainable Batteries.

LABURPENA:

Safety and sustainability are key parameters of modern rechargeable batteries, where the electrolyte is a main aspect significantly impacting the battery cell safety and thermal stability. There is a direct relationship between criteria like high ion conductivity, wide operating temperature range, and suitable electrochemical stability window; and the properties of the electrolyte that typically is composed of salt(s), solvent(s), and additives.

However, most widely used electrolyte salts generally contain fluorinated moieties such as the trifluoromethyl ($-\text{CF}_3$) group, which have very low chemical and biochemical degradability, despite its strong electron-withdrawing ability, essential for the dissolution and transport of ions in the electrolyte.

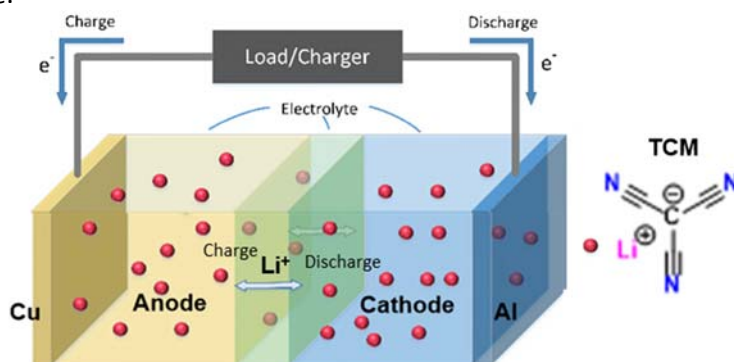


Fig. 1: Schematic diagram of a lithium-ion battery employing a fluorine-free salt.

In order to achieve safer and also more sustainable batteries, work has been done throughout the years in order to design and synthesize fluorine-free anions based on the concept of pseudo-delocalization.³ Enclosed in this concept, we can find salts based on anions with two negatively charged groups covalently attached to a central positively charged moiety.⁴

Following this path, the candidate will participate in the synthesis and characterization of new salts and/or additives designed in the group,⁵ and will evaluate their electrochemical performance in comparison to previously described ones.

HIZKUNTZA(K): English, Castellano, Euskara

TOKIA: CIC energiGUNE, Parque Tecnológico de Álava (Vitoria-Gasteiz)

IKERKETA TALDEA: Advanced Electrolytes and Cell Integration (EES)

WEBGUNEA: www.cicenergigune.com

POSTU KOPURUA: 1

ARDURADUNA: Maria Martínez

HARREMANETARAKO POSTA ELEKTRONIKOA: mmartinez@cicenergigune.com

³ Jónsson et al. *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **2012**, *14*, 6021–6025.

⁴ Hosseini-Bab-Anari et al. *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **2019**, *21*, 18393–18399.

⁵ a) Eshetu et al. *J. Am. Chem. Soc.*, **2018**, *140*, 9921–9933. b) Zhang et al. *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2019**, *58*, 7829–7834. c) Santiago et al. *ACS Appl. Energy Mater.* **2021** DOI: 10.1021/acsaem.1c00091.

- Bizkaiko Campusa

IZENBURUA:

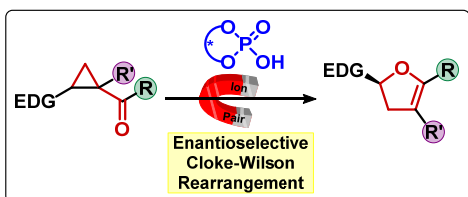
Sintesi Asimetrikoa, Kimika Jasangarria eta Prozesu Biomimetikoak
 Asymmetric Synthesis, Sustainable Chemistry and Biomimetic Processes

LABURPENA

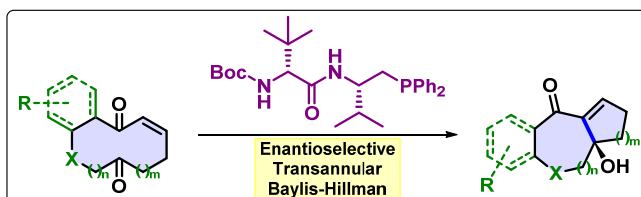
Gako-hitzak: Katalisia, Kimika Berdea, Jasangarrtasuna, Farmakoen Diseinua, Produktu Naturalak, SAR azterketa, Sintesi Kimikoa, Sintesi asimetrikoa

Gizarteak etengabe eskatzen ditu ongizatea bermatzen duten farmako berriak, gaitzak arinduz, gaixotasunak prebenituz eta sendatuz, bai eta diagnostiko klinikoak eginez ere. Urtero, batez beste, 50 farmako berri onartzen dira, eta horrek oinarritzko ikerketa eskatzen du fase klinikoko ebaluaziorako hautagai berriak prestatzeko. Gure taldea entitate kimiko berrien sintesi-metodologiak garatzen ari da, estrategia jasangarriak erabiltzera bideratutako ikuspegiarekin. Konposatu berri horiek diabetesa, minbizia edo gaixotasun kardiobaskularretan parte hartzen duten diana terapeutikoen aurrean ebaluatzen dira. Birusaren aurkako jarduera duten molekulen egitura-jarduera erlazioari buruzko azterlanak ere egin dira.

Kimika Berdea eta Prozesu Jasangarriak - Sintesi Asimetrikoa - Organokatalisia

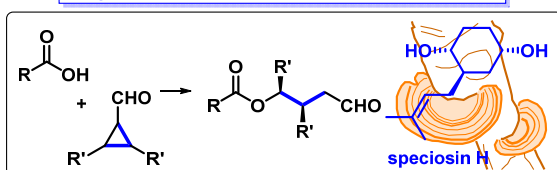


Angew. Chem. Int. Ed. **2018**, *57*, 8225-8229
 Highlighted in *Synfacts*, **2018**, 868.



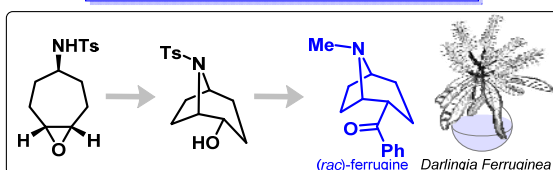
J. Am. Chem. Soc. **2019**, *141*, 9495-9499.
Catalysts **2022**, *12*, 67.

Farmakoen Diseinu et Sintesia Egitura-Aktibitatea erlazioaren ikerketa (SAR)



Chem. Eur. J. **2018**, *24*, 8764-8768.

Prozesu Biomimetikoak Produktu Naturalen eta Bioaktiboen Sintesia



Angew. Chem. Int. Ed. **2020**, *59*, 6780-6784.
Org. Biomol. Chem. **2021**, *19*, 3763-3775.
Eur. J. Org. Chem. **2021**, *20*, 2855-2861.

HIZKUNTZA(K): English, Castellano, Euskera

TOKIA: Zientzia eta Teknologia Fakultatea, UPV/EHU, Leioa (Bizkaia)

IKERKETA TALDEA: Sintesi Asimetrikoa, Kimika Iraunkorra eta Prozesu Biomimetikoak ikerketa taldea

WEBGUNEA: www.ehu.es/gsa

POSTU KOPURUA: 5

ARDURADUNA(K): José L. Vicario, M^a Luisa Carrillo, Efraím Reyes, Uxue Uria, Liher Prieto.

HARREMANETARAKO POSTA ELEKTRONIKOA: joseluis.vicario@ehu.es

IZENBURUA: 3d Metalen bidez katalizaturiko C-H aktibazioa burutzeko estrategiak. Aplikazio sintetikoak

LABURPENA

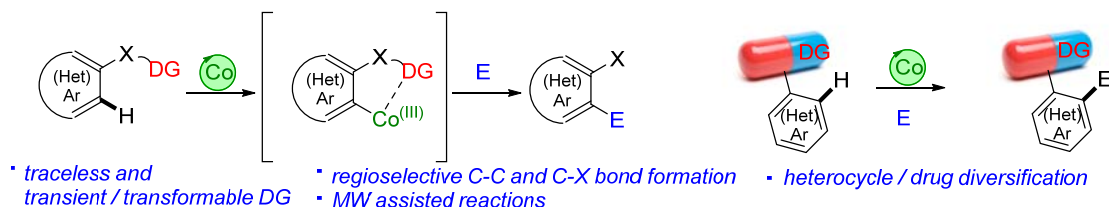
Metodologia sintetiko berritzaileen garapena ezinbestekoa da industria farmazeutikoan aktiboak izan daitezkeen molekula berrien prestakuntzarako. Hori dela eta, beharrezkoa da molekula konplexuen prestaketa modu seguru batean burutzeko metodologia sintetiko eta erreaktibotasun-patroi berriak garatzea, ingurugiroarekiko errespetua dela medio.

Metalen bidez katalizatutako C-H funtzionalizazioa funtsezko metodologia sintetiko bat da, zeinak funtzionalizatu gabeko substratuak erabiltzea ahalbidetzen duen molekula konplexuago batzuen prestaketarako. 3d trantsizio metalak, naturan ugariagoak direnak, duela gutxi hasi dira erabiliak izaten aipatutako transformazioak aurrera eramateko. Hau guztia kontuan hartuta, ekonomikoagoak diren eta toxikotasun maila baxuagoa duten metalak (Co(III), esaterako) katalizatzaile gisa erabiltzeak, aukera berriak planteatu egiten ditu erreaktibotasun eta aplikazio sintetiko berriak aurkitzeko.

Testuinguru honetan, gure proiektuen helburu orokorra C-C eta C-X loturak eratzeko metodologia efektibo eta selektiboen garapena da kobalto bidez katalizaturiko C(sp²)-H funtzionalizazio erreakzioetan oinarrituz. Katalisi asimetrikoa ere burutu egiten da.

Talde zuzentzaileak askotan erabili egiten dira erreakzio hauen erregioselektibotasuna kontrolatzeko. Zentzu honetan, eliminatu daitezkeen talde zuzentzaileak edota talde zuzentzaile iragankorrek erabiltzeak prozedura hauen aplikagarritasuna handitu ahalko luke, farmakoan zein produktu bioaktiboen dibertsifikazioan erabili ahal izateko.

Halaber, beste talde batzuekin lankidetzan, metodologia hauen bidez lortutako egituren propietate biologikoak ebaluatu egingo dira *in vitro* zein *in silico*.



HIZKUNTZA(K): Euskara, Gaztelania, Ingelesa

TOKIA: Zientzia eta Teknologia Fakultatea, UPV/EHU (Leioa, Bizkaia)

IKERKETA TALDEA: Organometalikoak Sintesian

WEBGUNEA: <https://www.ehu.eus/eu/web/oms/home>

POSTU KOPURUA: 3

ARDURADUNAK: Esther Lete, Nuria Sotomayor, Asier Carral

HARREMANETARAKO POSTA ELEKTRONIKOA: nuria.sotomayor@ehu.eus

IZENBURUA: Adimen Artifiziala eta kimioinformatika Kimika Sintetikoan aplikatuta

LABURPENA

Gure Master Amaierako Lanen proiektuek eredu konputazionalen (kimio-informatikoen) garapenera heltzen diote, aurkikuntza-prozesuak, sintesi organikoa, entsegu biologikoa, garapena edota produktu kimikoen ekoizpena optimizatzeko. Besteak beste, farmakoak, katalizatzaileak, biomarkatzaileak, txertoak, nano-partikulak, bio-erregaiak eta abar. Metodologia orokorrak sistema molekularren definizioa, egiturazko informazioaren prozesamendua eta deskribatzaile molekularren kalkulua barne hartzen ditu. Ondoren, Adimen Artifizialeko (AA) /(*Artificial Intelligence AI*) softwarea edota Ikasketa Automatikoa (IA)/ (*Machine Learning ML*) erabiltzen da eredu iragarleak aurkitzeko. Informazioa fusionatzeko teknikak (IF) erabiltzen dira, eta hainbat iturritako datuak prozesatzen dira. Aztertu beharreko sistemak honako hauek dira: molekula organikoak eta erreakzio kimikoak sintesian, proteinen egitura, erreakzio metabolikoen sare konplexuak, polimeroak, nano-partikulak, etab. Azterketa prediktiboak egiten dira propietate hobeak dituzten produktu berriak proposatzeko, eta, aldi berean, kostuak murrizten dira baliabide materialei, denborari eta laborategiko animalien erabilerari dagokienez. Gradu-programetan jaso ohi ez diren ikasketa teknika horiei buruzko prestakuntza eskaintzen diogu ikasleari. Master Amaierako lanek beste erakunde batzuekin egindako ikerketa-proiektuekin lotuta daude, hala nola PETRONOR, TEKNALIA, Biofisika, Gaiker eta abarrekin. Prestakuntza osagarria eskaintzen dugu (Europako erregulazioa eta OCED), Kimioinformatikan datuak erabiltzearekin lotuta dauden legedi eta bioetika alderdietan..

HIZKUNTZA(K): Euskara, Gaztelania, Ingelesa

TOKIA: Zientzia eta Teknologia Fakultatea, UPV/EHU (Leioa, Bizkaia)

IKERKETA TALDEA: Organometalikoak Sintesian (OMS), CHEMPTML

WEBGUNEA: <https://www.ehu.eus/es/web/oms/home>
<https://www.ikerbasque.net/humberto-gonzalez-diaz>

POSTU KOPURUA: 2

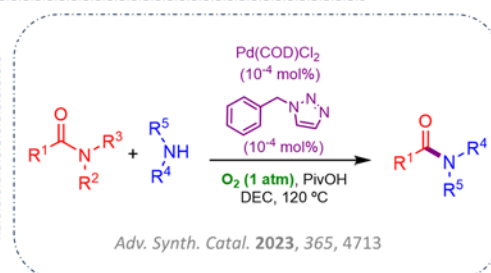
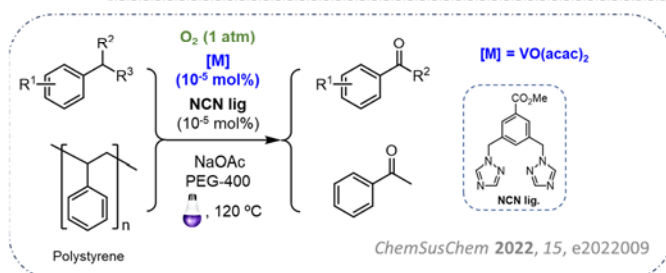
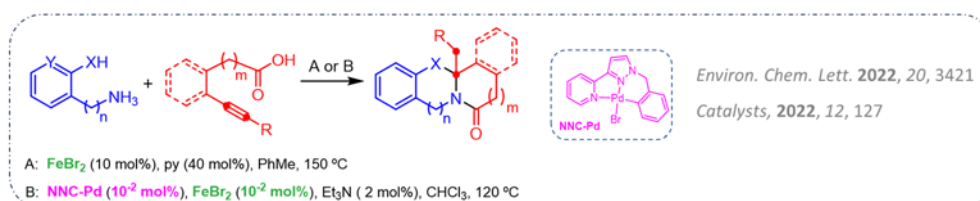
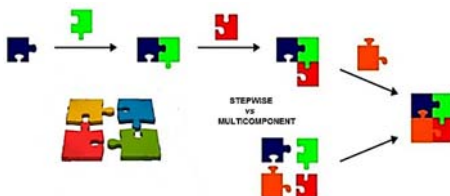
ARDURADUNAK: Sonia Arrasate, Humberto González-Díaz

HARREMANETARAKO POSTA ELEKTRONIKOA: humberto.gonzalezdiaz@ehu.eus;
sonia.arrasate@ehu.eus

IZENBURUA: Erreakzionatzaile eta erreakzio-ingurune jasangarrien bidezko prozesu katalitikoen garapena

LABURPENA

Ikerketa-lan honetan, propietate biologikoengatik interesekoak diren sistema poliheterozikliko konplexuen sintesirako prozedura zuzenak garatuko dira urjauzi/cascade edo osagai-anitezko erreakzioetan oinarritutakoak. Halaber, oxigeno molekularren bidezko aldakuntzen bitartez nahitaezko lehengaiak eskuratuko dira. Konposatu naturalen hezurdura poliziklikoen pausu bakarrean eraikitzea ahalbideratuko duten estrategiek, toxikotasunik gabeko erreakzionatzaileak, katalizatzaileen kantitate urriak eta ingurugiroarekiko adeitsuak diren erreakzio-baldintzak erabiliko dituzte. Esate baterako, dioxigenoa bezalako oxidatzaileei lehentasuna emango zaie, eta transmetalatzaileak (ziklazioetan) edo azil kloruroak (amidazioetan) ekidingo dira. Beroketa termikoaren ordezkari mikrouhinen bitartezko aktibazioa arlo honetan ikertuko da, bai eta ura edo bestelako disolbatzaile jasangarrien edo disolbatzailerik gabeko erreakzioen erabilera ere.



HIZKUNTZA(K): Euskara, Gaztelania, English

TOKIA: Zientzia eta Teknologia Fakultatea, UPV/EHU

IKERKETA TALDEA: NEWSYNMETH Ikerketa taldea

WEBGUNEAK: : <https://www.ehu.eus/nsm>

[Dr. Raul SanMartin \(google.com\)](mailto:Dr. Raul SanMartin (google.com)@ehu.eus)

POSTU KOPURUA: 5

ARDURADUNA(K): RAUL SANMARTIN, MARÍA TERESA HERRERO, GARAZI URGOITIA

HARREMANETARAKO POSTA ELEKTRONIKOA: raul.sanmartin@ehu.eus

IZENBURUA: RECONOCIMIENTO MOLECULAR: La interacción de glicanos y glicoproteínas con lectinas humanas en procesos patológicos: Cáncer y enfermedades virales

LABURPENA Las células eucariotas están cubiertas por una densa capa de glicanos (carbohidratos). En los últimos años se ha puesto de manifiesto la relación entre la disfunción en la biosíntesis de glicanos con la malignidad del cáncer. De hecho, la glicosilación aberrante es una característica de las células cancerosas, que usan lectinas (proteínas de unión a glicanos) de las células del sistema inmune para enmascararse y progresar. Por otra parte, los glicanos de la superficie de nuestras células también representan la primera línea de interacción en la interfaz virus-huésped. De hecho, los virus presentan lectinas en su superficie que usan como llave para colonizar las células del huésped.

El diseño racional de estrategias de prevención e intervención frente a estas patologías requiere un conocimiento detallado, idealmente a resolución atómica, del mecanismo de interacción entre los glicanos y las lectinas. Nuestras investigaciones se centran en desentrañar, a escala química, los mecanismos moleculares que dictan la especificidad de esta unión para diseñar nuevas moléculas, tanto entidades químicas como anticuerpos, que permitan tratamientos específicos y eficaces.

Utilizando técnicas integradoras de química, biología molecular y estructural (síntesis, Resonancia Magnética (RMN), cristalografía de rayos X y química computacional), hemos elucidado las interacciones a escala molecular que se dan entre anticuerpos y glicanos naturales y modificados sintéticamente con Siglecs y galectinas, lectinas relacionadas con cáncer, y lectinas de distintos virus, incluyendo coronavirus. También hemos establecido las bases para generar moléculas terapéuticas mediante síntesis química e ingeniería de proteínas.

Los 4 proyectos que se ofrecen se dirigen al estudio de las interacciones entre: **A) la glicoproteína CD44, asociada con una alta agresividad del cáncer, con lectinas humanas; B) anticuerpos y glicanos, naturales y sintéticamente modificados, con Siglecs; C) glicanos naturales y sintéticos, etiquetados con núcleos de ¹³C y ¹⁹F con galectina-9; D) Glicanos generados por síntesis química con lectinas del virus de la gripe A.** Estos conocimientos se usarán posteriormente para diseñar moléculas de alta afinidad que permitan combatir los procesos patológicos correspondientes.

En todos los proyectos, las personas elegidas aprenderán a aplicar un enfoque científico multidisciplinar: química sintética, biología molecular, técnicas modernas de RMN y cristalografía de rayos X para caracterizar la estructura de estas moléculas complejas y deducir su interacción con sus receptores, usando también programas de química computacional de última generación.

Referencias anteriores de los equipos investigadores relacionadas con esta propuesta:

1. <https://www.who.int/news-room/fact-sheets/detail/cancer>
2. *Virus: Nat Commun.* 15, **2024**, 2979; *Angew Chem Int Ed* 61, **2022**, e202201432. *Nat Commun.* **2021**; 12: 5449. *J Am Chem Soc.* **2022**; 144: 424. *Angew Chem Int Ed* **2020**; 59: 23763
3. *Siglecs, glycans & cancer: Nat. Commun.* **2017**, 8 764. *JACS Au* **2022**, 3, 204. *Nat. Commun.* **2023**, 14, 3496. *ACS Chem. Biol.* **2024**, 19, 483. *Chem. Sci.* **2024**, DOI: 10.1039/D4SC01723D.
4. *Galectins & glycans: Glycobiology.* **2024**; 34: cwa002. *Pharmaceuticals.* **2022**; 15: 145; *Angew Chem Int Ed.* **2021**, 60: 18777; *RSC Chem Biol.* **2021**; 2: 932; *Chem. Eur. J.* **2020**; 26: 15643.

HIZKUNTZA(K): ESPAÑOL, INGLÉS

TOKIA: CIC bioGUNE, Parque Científico y Tecnológico de Bizkaia, Derio (Bizkaia)

IKERKETA TALDEAK: CHEMICAL GLYCOBIOLOGY, CANCER GLYCOIMMUNOLOGY

WEBGUNEAK: <https://www.cicbiogune.es/people/jjbarbero>;
<https://www.cicbiogune.es/people/jereno>

POSTU KOPURUA: 4

ARDURADUNA(K): Ana Ardá, June Ereño-Orbea, Ana Gimeno, Jesús Jimenez-Barbero, Luca Unione

HARREMANETARAKO POSTA ELEKTRONIKOA: aarda@cicbiogune.es; jereno@cicbiogune.es;
agimeno@cicbiogune.es; jjbarbero@cicbiogune.es; lunione@cicbiogune.es

IZENBURUA: Synthesis of water soluble tetrazine derivatives to modify amphiphilic fluorinated polymers for bioorthogonal chemistry with polymer coated nanoparticles.

LABURPENA: We have recently optimised a method to prepare amphiphilic fluorinated polymers with customised composition and used them to solubilise gold nanoparticles through polymer coating taking advantage of hydrophobic interactions of fluorine (Figure 1). Given the simplicity of both the synthesis and encapsulation process with these polymers, we envisage their potential for encapsulation of other cargos that need to be transferred to the water phase, such as different plasmonic or fluorescent nanoparticles with potential biomedical applications in the field of neural stimulation *via* photoactivation.⁶ In order to increase the selectivity of those polymer coated nanoparticles, we envisage the use of bioorthogonal chemistry to achieve selective binding of those nanoparticles to the selected target.⁷

For this purpose, we propose the preparation of small building blocks containing (i) a tetrazine group (for reaction with trans-cyclooctene derivatives through bioorthogonal chemistry), (ii) a solubilizing moiety to render the tetrazines water soluble and (iii) an amino-ending group for modification of the polymer.

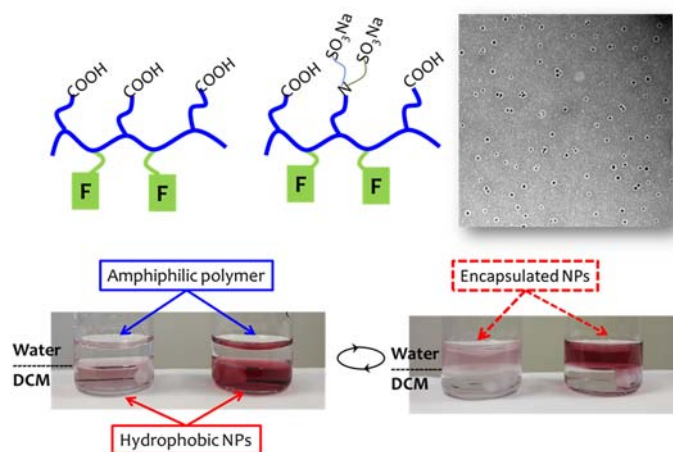


Figure 1. Summary of amphiphilic polymers and their use for the encapsulation of gold nanoparticles

HIZKUNTZA(K): English, Español,

TOKIA: Instituto Biofisika

IKERKETA TALDEA: FluoroNanoTools Laboratory

WEBGUNEA: <https://www.biofisika.org/en/research/fluoronanotools-laboratory>

POSTU KOPURUA: 1

ARDURADUNAK: Mónica Carril y Galder Llorente

HARREMANETARAKO POSTA ELEKTRONIKOA: monica.carril@ehu.eus

⁶ "Time for NanoNeuro". Aitzol Garcia-Etxarri, and Rafael Yuste. *Nature Methods* **2021**, *18*, 1287.

⁷ "Ligand-directed two-step labeling to quantify neuronal glutamate receptor trafficking" Kento Ojima, Kazuki Shiraiwa, Kyohei Soga, Tomohiro Doura, Mikiko Takato, Kazuhiro Komatsu, Michisuke Yuzaki, Itaru Hamachi, Shigeki Kiyonaka. *Nature Communications* **2021**, *12*, 831.

IZENBURUA: Synthesis of an AMPAR and tetrazine derivatives for ligand-directed biorthogonal targeting of neural cells with gold nanoparticles.

LABURPENA

Neural stimulation by photoactivation of gold nanoparticles is a promising field of research to tackle severe brain diseases. To achieve such stimulation, plasmonic gold nanoparticles must be attached in a selective manner to the surface of neural cells in the brain. To achieve such selective binding, ligand directed biorthogonal click chemistry will be used. First, a derivative with a selective ligand (AMPAR) for glutamate receptors on neural cells will be modified to incorporate a cleavable reactive group that will be covalently tethered onto the receptor. Such molecule will also incorporate a TCO moiety that will react in a biorthogonal manner with tetrazine derivatives placed on the gold nanoparticles. With this approach we ensure the targeting of neural cells (through AMPAR) and the selective binding of nanoparticles through biorthogonal click chemistry.

The project consists of the synthesis of the AMPAR derivative and tetrazine PEG ligands that will be used later on to functionalise gold nanoparticles shown in the following figure.

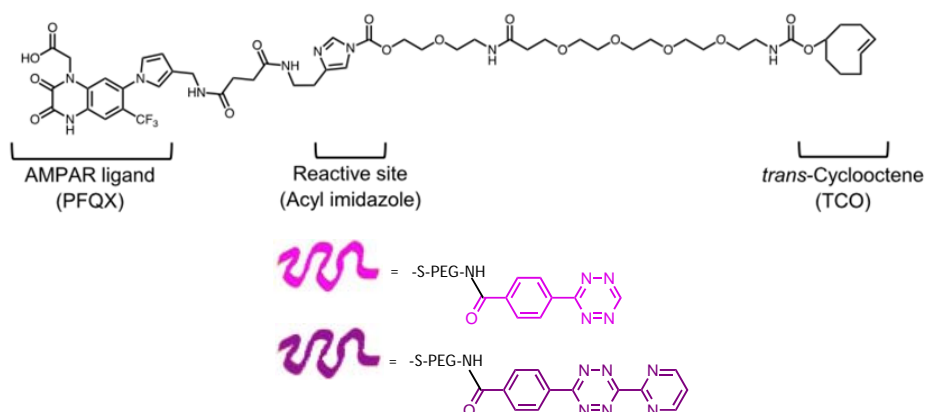


Figure 1. Summary of the structures to be synthesised.

HIZKUNTZA(K): English, Spanish

TOKIA: Instituto Biofisika (CSIC, UPV/EHU), Leioa, Bizaia

IKERKETA TALDEA: FluoroNanoTools Laboratory

WEBGUNEA: <https://www.biofisika.org/en/research/fluoronanotools-laboratory>

POSTU KOPURUA: 1

ARDURADUNAK: Mónica Carril y Davide Bello

HARREMANETARAKO POSTA ELEKTRONIKOA: monica.carrilg@ehu.eus

- Gipuzkoako Campusa

IZENBURUA: Metalek katalizatutako C-H funtzionalizazioa

LABURPENA

C–H funtzionalizazioa egungo kimikaren arlo gorikoen artean kokatzen da. Izan ere, bestela erreakzionatzeko gai ez diren C–H loturak eraldaketa kimikoetarako talde funtzional arruntzat hartzeko aukera dakar, eta honek sintesi kimikoak diseinatzekeo garaian iraultza bat suposatzen du kimika organikoaren baitan. Geure ikerketa taldearen helburuak medikuntzaren esparruan garrantzia duten konposatuen eraikuntzarako metalek katalizatutako C–H funtzionalizazio erreakzio berritzaile eta jasangarrien garapenean datza. Lanaren helburua katalisi metalikoaren ebaluazioa egitea izango da, peptidoak aldatzeko tresna praktikoa gisa. Proiektu honetan zehar, ikaslea peptidoen sintesia barne hartzen duen kimika organiko klasikora ohituko da, baita C-H loturak aktibatu ondorengo eraldaketa organometaliko modernoetara ere.



HIZKUNTZA(K):Euskera, Ingelesa, Gaztelania

TOKIA: Joxe Mari Korta Zentroa, Donostia

IKERKETA TALDEA:: Katalisi Jasangarria: Metodoak eta Konputazioa

WEBGUNEA: <https://www.ehu.eus/eu/web/qbbm/arkaitz-correa>

POSTU KOPURUA: 2

ARDURADUNA: Arkaitz Correa

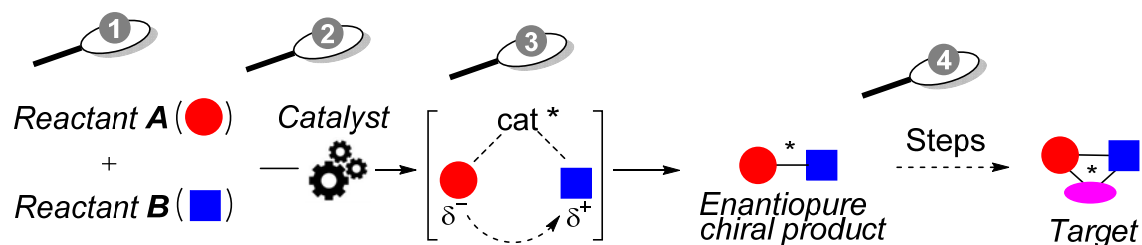
HARREMANETARAKO POSTA ELEKTRONIKOA: arkaitz.correa@ehu.eus

IZENBURUA: Katalisi asimetrikoa organokatalizatzaile kiralak erabiliz

LABURPENA:

Ikerketa lan bat egiteko aukera eskaitzen da sintesi organikoaren esparruan, eta zehatzago (organo)katalisiaren inguruan, aurrera daramagun ikerketa proiektu batean txertaturik. Sintesi organikora bideratutako laborategian murgilduko da ikaslea eta bertan landuko ditu, besteak beste, nola erabili ezaugarri desberdineko errektiboak, disolbatzaileak, errektzio sistemak, laborategiko tresneria espezializatua, banaketa eta analisi teknikak, bibliografia zientifikoa,... eta datuen interpretazioan eta hauen azalpenean trebatu.

Gaur egun daramatzagun proiektuak C-C eta C-heteroatomo loturak estereoselektiboki sortzeko errektzio berrien diseinura bideratuak daude, non katalizatzaileek paper nagusia duten. Ikerketak hainbat aztergai ditu, besteen artean honakoak: (1) errektibo eta "plantilla" berrien diseinua, (2) (organo)katalizatzaile berrien diseinua eta garapena, (3) aktibazio mekanismoen eta errektzioaren estereokontrolaren azterketa, (4) lortutako molekulen manipulazio kimikoa, produktu konplexuagoak lortzearen. Azken helburua izanik metodo berri hauek erabilgarriak izan daitezzen erabilera praktikoa, eta bereziki aktibitate biologikoa, duten konposatuak lortzeko.



HIZKUNTZAK: Euskera, Gaztelania, Ingelesa

LEKUA: Kimika Fakultatea, Donostia-San Sebastián

IKERKETA TALDEA: Katalisi asimetrikoa eta sintesi kimikoa

WEB GUNEA: <https://www.ehu.es/eu/web/gicas/hasiera>

PLAZA KOPURUA: 4

ARDURADUNAK: Iñaki Ganboa, Aitor Landa, Antonia Mielgo, Mikel Oiarbide

HARREMANETARAKO E-MAILAK: joseignacio.ganboa@ehu.es, a.landa@ehu.es, antonia.mielgo@ehu.es, mikel.oiarbide@ehu.es

IZENBURUA: Erreakzio erradikaleko selektibitatea

LABURPENA

Historikoki, erradikalen kimikak arreta gutxi jaso du kimika sintetikoko beste metodo batzuekin alderatuta, elektroien desagertuak dituzten espezieen erreaktibotasun handiagatik eta hautakortasun eskasagatik. Hala ere, azken urteotan garrantzi handia hartu du, erreakzio-baldintza leunetan erradikalak sortzeko metodoak garatu direlako. Gure ikerketa-taldean, metodo konputazionalak erabiltzen dira erreakzio-mekanismoak aztertzeko, eta prozesu kimikoak ulertzea ahalbidetzen duten funtsezko aldagaiak aurkitzen dira. TFMaren helburua da espezie erradikalarioen erreaktibotasunari eragiten dioten faktoreak ulertzea (elektroi aparatuek dituzten antzeko espezieekin alderatuta), sintesi-prozesu eraginkorragoak eta garbiagoak diseinatzeko eta prozesu horien selektibitatea aldatzeko katalizatzaile espezifikoak garatzeko. Bereziki, kalkulu-programak erabiliko dira (g16/ADF/jaguar) uhin-funtzioa aztertzeko tresnekin batera. Ez da beharrezkoa ikasleak alde aurretik jakitea zer tresna erabiliko dituen.

HIZKUNTZA(K): Gaztelania/Ingelesez

TOKIA: DONOSTIAKO KIMIKA FAKULTATEA (UPV/EHU)

IKERKETA TALDEA: Kimika organiko konputazionala

WEBGUNEA: adecozar.com

POSTU KOPURUA: 3

ARDURADUNA(K): Abel de Cózar

HARREMANETARAKO POSTA ELEKTRONIKOA: abel.decozar@ehu.es

IZENBURUA: CHIRAL MULTICOLOR QUANTUM DOTS FOR MONITORING BIOLOGICALLY RELEVANT PHENOMENA

LABURPENA:

Recently, Carbon Quantum Dots (CQDs) have been described as a new class of carbon nanoparticles, which have drawn attention as possible competitors to conventional QDots (of metallic nature, Cd, Te, Au, etc), due to high chemical stability and low toxicity. CQDs are used in various fields of application, such as bioimaging, medical diagnostics, biological sensing, chemical sensing, photocatalysis, and photovoltaic devices (Lim, Shen and Gao, 2014). These CQDs are quasi-spherical nanoparticles, featuring an amorphous and/or crystalline carbon scaffold composed of graphitic carbon or graphene and graphene oxide sheets combined sp³ hybridized carbon that exhibit fluorescent properties. The physicochemical behavior of CQDs can be easily tailored by surface functionalization and/or passivation. Depending on the synthetic route, the oxygen functional groups present in CQDs can vary from 5 wt% to 50 wt% (Baker & Baker, 2010). The solubility of CQDs in water and functionalization depends mainly on the presence of carboxylic groups on the surface, which is controlled by the synthetic route (Zhu et al., 2012). CQDs are generally obtained via two routes: "top-down" and "bottom-up". Two of the most commonly used synthetic methodologies within these two routes are those involving the use of microwave irradiation and hydrothermal conditions. (Baker & Baker, 2010; Cao et al., 2007; Li et al., 2010).

The project aims to:

- 1- Obtain chiral CQDs.
- 2- Characterise the photophysical properties of chiral CQDs.
- 3- Study the emerging properties of this new family of chiral CQDs.

HIZKUNTZA(K): Euskera, ingelesa, gaztelania

TOKIA: Kimika Fakultatea, Donostia, UPV/EHU. Joxe Mari Korta Zentroa

IKERKETA TALDEA: Kimika Bioorganikoa eta Modelizazio Molekularraren Ikerketa taldea
(QuiBioSupraMM)

WEBGUNEA: <https://www.ehu.es/eu/web/qbmm/hasiera>

POSTU KOPURUA: 1

ARDURADUNAK: FERNANDO P. COSSÍO, IVÁN RIVILLA, NEREA ALBERRO, AMANDA RIBEIRO

HARREMANETARAKO POSTA ELEKTRONIKOA: fp.cossio@ehu.es; ivan.rivilla@ehu.es,
nerea.alberro@ehu.es, amandar.ribeiro@ehu.es

IZENBURUA: THEORETICAL STUDY OF DNA INTERACTION WITH POLYELECTROPHILIC COMPOUNDS OF POSSIBLE ANTITUMOUR ACTIVITY.

LABURPENA:

The application of DNA-targeting compounds represents a prevalent strategy in cancer treatment. Two prominent families of such compounds, nitrogen mustards, and cisplatin derivatives, have been developed for this purpose. Their mechanism of action relies on second-order SN2 nucleophilic reactions, wherein DNA, typically guanine, acts as a nucleophile and attacks the electrophilic chemotherapeutic agent, displacing the leaving group.

Despite the well-characterized binding modes between chemotherapeutic agents and DNA, computational studies leveraging quantum mechanics calculations and modeling can provide a deeper understanding of these interactions. These studies offer critical insights that are invaluable for the design of novel chemotherapeutic agents.

The proposed research will involve conducting computational calculations (DFT, ONIOM, docking, etc.) using a DNA model currently under development by our research group alongside polyelectrophilic compounds synthesized in our laboratory.

HIZKUNTZA(K): Euskera, ingelesa, gaztelania

TOKIA: Kimika Fakultatea, Donostia, UPV/EHU. Joxe Mari Korta Zentroa

IKERKETA TALDEA: Kimika Bioorganikoa eta Modelizazio Molekularraren Ikerketa taldea
(QuiBioSupraMM)

WEBGUNEA: <https://www.ehu.es/eu/web/qbmm/hasiera>

POSTU KOPURUA: 1

ARDURADUNAK: FERNANDO P. COSSÍO, IVÁN RIVILLA, NEREA ALBERRO, AMANDA RIBEIRO

HARREMANETARAKO POSTA ELEKTRONIKOA: fp.cossio@ehu.es; ivan.rivilla@ehu.es,
nerea.alberro@ehu.es, amandar.ribeiro@ehu.es

IZENBURUA: SYNTHESIS AND CHARACTERISATION OF RADIOMETRIC SENSORS OF BARIUM CATIONS (2+) CATIONS FOR USE IN NEUTRINO-FREE DOUBLE-DECAY EXPERIMENTS

LABURPENA:

The main goal is to synthesize novel fluorescent heterocycles that exhibit shifts in their emission spectra in the presence of Ba²⁺ cations. These compounds will be designed with optimized photophysical properties to achieve high quantum yields and signal-to-noise ratios, which are essential for facilitating Xe to Ba²⁺ reactions in neutrinoless double beta decay experiments.

For more information, see Rivilla I, Aparicio B, et al. "Fluorescent bicolor sensor for low-background neutrinoless double β decay experiments." *Nature*. 2020 Jul;583(7814):48-54. doi: 10.1038/s41586-020-2431-5.

HIZKUNTZA(K): Euskera, ingelesa, gaztelania

TOKIA: Kimika Fakultatea, Donostia, UPV/EHU. Joxe Mari Korta Zentroa

IKERKETA TALDEA: Kimika Bioorganikoa eta Modelizazio Molekularraren Ikerketa taldea (QuiBioSupraMM)

WEBGUNEA: <https://www.ehu.eus/eu/web/qbmm/hasiera>

POSTU KOPURUA: 1

ARDURADUNAK: FERNANDO P. COSSÍO, IVÁN RIVILLA, NEREA ALBERRO, AMANDA RIBEIRO

HARREMANETARAKO POSTA ELEKTRONIKOA: fp.cossio@ehu.eus; ivan.rivilla@ehu.es, nerea.alberro@ehu.eus, amandar.ribeiro@ehu.eus

IZENBURUA: PALADIO-LIGANDOEN DISEINUA

LABURPENA

Sintesi Organiko eta Kimika Konputazionala arloen arteko lan bat eskaintzen da, Katalisi Jasangarri Taldean garatzen ari garen proiektu baten barruan. Gure taldea Kimika Fakultatean dago, eta Korta ikerketa-zentroan (Tolosa hiribidea) kokatzen da.

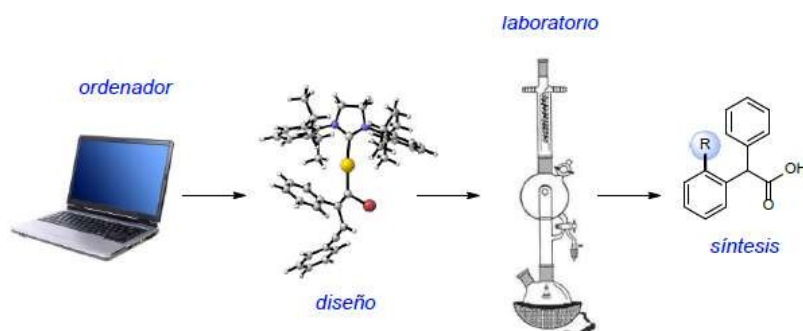
Paladio, Nikel edo Rhodio bezalako trantsizio metalekin lotzen diren ligandoak diseinatzea, eta sortutako konplexuak erreakzio sintetiko modernutan erabiltzea dira gure helburua.

Metodo horiek oso interesgarriak dira molekulen sintesirako, gero jarduera biologikoagatik, farmazeutikoagatik, etab. interesa daukatelako molekula horiek.

Proiektuak bi alderdi ditu:

- DISEINUA: Ordenagailua erabiliz, konplexu aktiboenak sortuko dituzten ligandoak bilatuko dira. Horretarako punta-puntako softwarea erabiliko da (Gaussian, Molden, etab.), UPV/EHU-n dagoen superkonputazio zerbitzuak ematen dituen programak eta aukerak direla medio. Zati teoriko honetan, kalkulu software-a erabiltzen zerotik ikasiko da, eta beraz, EZ da beharrezkoa aldezturik kimika teorikoko edo konputazioko ezagutzak izatea.

- SINTESIA: Hasiera batean, kalkuluen bidez, arrazionalki aurrez diseinatutako ligandoak prestatuko dira laborategian esperimentalki, sekuentzia sintetiko sinpleak erabiliz. Ondoren, ligando horiek erreakzio katalitiko interesgarrietan erabiliko dira. Prozesuan zehar, banatze-teknikak eta teknika espektroskopiko berrienak ikasiko dira. Ikaslearen asmoen arabera, alderdi teorikoan edo esperimentalean jarriko da azpimarra. Beraz, TFM lan bat, soilik esperimentala, soilik teorikoa, edo bien nahasketa bat egin daiteke. Hori guztia, taldeko beste lankideekin batera, kolaborazioan garatu daiteke.



HIZKUNTZA(K): EUSKARA, CASTELLANO, ENGLISH

TOKIA: KORTA ERAIKINA. KIMIKA FAKULTATEA, DONOSTIA

IKERKETA TALDEA: KATALISI JASANGARRIA: METODOAK ETA KONPUTAZIOA

WEBGUNEA: <https://www.ehu.es/es/web/qbbm/home>

POSTU KOPURUA: 2

ARDURADUNA(K): ENRIQUE GOMEZ BENGEOA, ROSA M. LOPEZ, MAIALEN SAGARTAZU

HARREMANETARAKO POSTA ELEKTRONIKOA: enrique.gomez@ehu.es

IZENBURUA: Catalytic generation of planar chirality

LABURPENA

Planar chirality is one of the most fascinating expressions of chirality, which is exploited by nature to lock three-dimensional chiral conformations and, more recently, by chemists to create new chiral reagents, catalysts, and functional organic materials. Nevertheless, the shortage of procedures able to induce and secure asymmetry during the generation of these unique chiral entities has dissuaded chemists from exploiting their structural properties. We try to mitigate this scarcity by designing unconventional procedures devoted to conquering three-dimensional complexity making use of the three pillars of asymmetric catalysis: Biocatalysis, Metal Catalysis and Organocatalysis.

The proposed TFM's will cover fundamental aspects in organic chemistry, e.g. the design and optimization of new reagents and catalytic systems, from accessible simple molecules, and the elucidation of the reaction mechanisms through experimental and computational studies.

Depending on the student's preferences, emphasis will be placed on the experimental or in the theoretical approach to carry out a purely experimental, purely theoretical TFM work, or a mix of both approaches (*It is NOT necessary to have previous knowledge of theoretical chemistry or computer science*).



HIZKUNTZA(K): EUSKARA, CASTELLANO, ENGLISH

TOKIA: KORTA ERAIKINA. KIMIKA FAKULTATEA, DONOSTIA

IKERKETA TALDEA: KATALISI JASANGARRIA: METODOAK ETA KONPUTAZIOA

WEBGUNEA: <https://www.ehu.es/es/web/qbbm/home>

POSTU KOPURUA: 2

ARDURADUNA(K): ENRIQUE GOMEZ BENGUA, ROSA M. LOPEZ, MAIALEN SAGARTZAZU

HARREMANETARAKO POSTA ELEKTRONIKOA: enrique.gomez@ehu.es

IZENBURUA

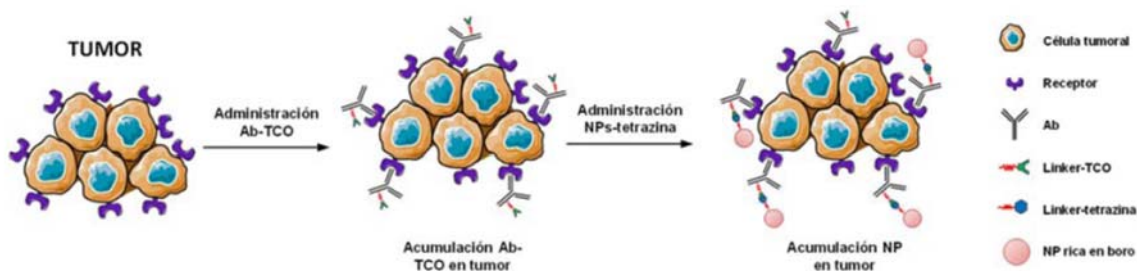
Pre-targeting estrategiaren bitartez sintetizatutako Boro-zko nanopartikulen erabilera, tresna terapeutiko gisa

LABURPENA

Neutroien atzemate bidezko minbizi terapiaren oinarria tumorean boro-10 atomoak metatzea da. Ondoren, tumorea neutroi termikoekin irradiatzen da, eta horrek in situ erreakzio nuklearra eragiten du. Erreakzio horren ondorioz, heriotza zelularra eragiteko gai diren partikula oso ionizatuak igortzen dira. Terapia hori arrakastaz aplikatzeko, tumore-zeluletan boro-atomo kantitate esanguratsu bat selektiboki metatzeko gai diren farmakoak garatu behar dira. Hori lortzeko, Jordi Llop buru duen ikerketa-taldeak pre-targeting estrategia bat proposatzen du, honako honetan datzana (ikus irudia): (i) trans-ziklootenoarekin (TCO) funtzionalizatua dagoen Antigorputz (Ab) espezifiko bat ematen da. (ii) Tumorean selektiboki metatu ondoren, boroan aberatsak diren nanopartikulak (NPak) ematen dira, oso tamaina txikikoak (4-5 nm), tetrazinarekin funtzionalizatuak, TCOarekin bioortogonalki erreakziona dezaketenak. Horren ondorioz, NPak pilatzen dira antigorputza (tumorea) pilatu den eremuetan.

Proposatutako proiektuak honako hau lortu nahi du:

1. Boroan aberatsak diren eta tetrazinarekin funtzionalizatuta dauden nanopartikulak (NP) prestatzea eta karakterizatzea.
2. Trans-ziklootenoarekin (TCO) selektiboki funtzionalizatutako antigorputzak (Abs) prestatzea eta haien ezaugarriak zehaztea.
3. Ab eta NPen banaketa-eredua ebaluatzea, saguaren tumore-eredu bat eta irudi nuklearreko teknikak erabiliz (positroi-emisio bidezko tomografia).
4. Tumore-eredu horretan pre-targeting estrategia ebaluatzea, tumorean metatutako boro-kantitatea denboraren arabera zehazteko.
5. Emaitzak in vivo balioztatzea ex vivo analisi-tekniken bidez (ICP-MS).



HIZKUNTZA(K): Gaztelania, English

TOKIA: CIC BiomaGUNE, Guipuzkoako Zientzia eta Teknologia Parkea, Donostia

IKERKETA TALDEA: RADIOQUÍMICA ETA IRUDI NUKLEAR

webgunea: WWW.CICBIOMAGUNE.ES / [HTTP://PERSONAL.CICBIOMAGUNE.ES/JLLOP/](http://PERSONAL.CICBIOMAGUNE.ES/JLLOP/)

POSTU KOPURUA: 2

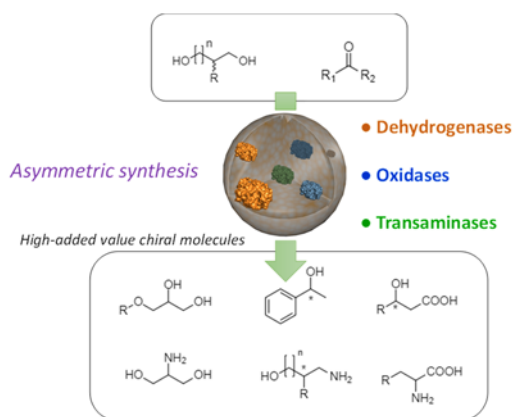
ARDURADUNA(K): JORDI LLOP ROIG

HARREMANETARAKO POSTA ELEKTRONIKOA: JLLOP@CICBIOMAGUNE.ES

IZENBURUA: SÍNTESIS BIOCATALÍTICA DE AMINOALCOHOLES Y AMINOÁCIDOS QUIRALES CON INTERÉS EN QUÍMICA FINA

LABURPENA

La síntesis enantoselectiva de aminoalcoholes es fundamental en el contexto de la química industrial ya que estas moléculas forman parte del esqueleto de muchos compuestos de alto valor añadido, como fármacos, fitosanitarios, aditivos alimentarios y polímeros, entre muchos otros (ver figura). En este proyecto de máster se buscará el desarrollo de métodos enzimáticos para la valorización de residuos agrícolas y plásticos en compuestos de alto valor añadido (p.e fármacos y aditivos) mediante transformaciones enzimáticas enantioselectivas. Las enzimas nos permitirán llevar a cabo esquemas sintéticos complejos (multietapa) en condiciones acuosas y temperaturas y presión ambientes, lo que nos permitirá aumentar la sostenibilidad tanto medioambiental como económica de estos procesos. Para lograr este objetivo, llevaremos a cabo el cribado y selección de diferentes enzimas (oxidorreductasas, tranferasas, hidrolasas), la



inmovilización de estas en soportes sólidos para aumentar su estabilidad y mejorar su procesabilidad, y el desarrollo de métodos analíticos (espectrofotométricos y cromatográficos) para la identificación de los productos y la cuantificación de la productividad y selectividad de los biocatalizadores. El objetivo final del trabajo de final de master desarrollar un sistema multi-enzimático heterogéneo (inmovilizado) capaz de sintetizar aminoalcoholes con una alta productividad y estabilidad operacional.

HIZKUNTZA(K): CASTELLANO E INGLES

TOKIA: CIC BIOMAGUNE

IKERKETA TALDEA: BIOCATALISIS HETEROGÉNEA

WEBGUNEA: <https://flg802.wixsite.com/flopezgallego>

POSTU KOPURUA: 1

ARDURADUNA: FERNANDO LÓPEZ GALLEGO

HARREMANETARAKO POSTA ELEKTRONIKOA: flopez@cicbiomagune.es