



UNIVERSIDAD DE EXTREMADURA

FACULTAD DE CIENCIAS

ANEXO 1 PROPUESTA DE TRABAJO FIN DE GRADO

-DEPARTAMENTO DE LA UEX RESPONSABLE DE LA OFERTA: *Ingeniería Química y Química Física*

-TÍTULO DEL TRABAJO: *Caminando sobre superficies de energía potencial*

- CARACTERÍSTICAS DEL TRABAJO FIN DE GRADO

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

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

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

OBJETIVOS

- O1: Involucrar a los estudiantes en la tarea intelectualmente estimulante y satisfactoria del proceso de aprendizaje.
- O4: Desarrollar en los estudiantes habilidades/capacidades de comprensión, interpretación, aplicación y transmisión (de forma oral y por escrito) de sus conocimientos químicos, teóricos y prácticos.
- O5: Proporcionar a los estudiantes una base de conocimientos y habilidades con los que pueda continuar sus estudios en áreas especializadas de la Química o en áreas multidisciplinares.

COMPETENCIAS

- C2: Interpretar las estructura atómica y los principios de química cuántica.
- C4: Identificar las características de los diferentes estados de la materia y las teorías empleadas para describirlos.
- C5: Diferenciar los tipos principales de reacción química. Principios de termodinámica, cinética y electroquímica.
- C9: Asimilar la relación entre propiedades macroscópicas y propiedades de átomos y moléculas individuales.

- C12: Efectuar el tratamiento matemático de datos procedentes de procesos químicos y gestión de calidad de los laboratorios.
- C19: Evaluación, interpretación y síntesis de datos e información química. Obtención, procesamiento y tratamiento, mediante técnicas computacionales, de datos químicos.
- C23: Conocimiento de una lengua extranjera (preferentemente inglés).
- C24: Utilización de las tecnologías de la información y la comunicación (TIC's) más adecuadas en cada situación.
- C27: Capacidad de relación de la Química con otras disciplinas.
- C28: Capacidad de:
- Utilización correcta del método de inducción y generación de nuevas ideas.
 - Análisis y síntesis.
 - Organización y planificación.
 - Trabajo en un contexto internacional.
 - Expresión tanto oral como escrita.
 - Razonamiento crítico. Resolución de problemas.
 - Toma de decisiones.
 - Trabajo en equipo (también de carácter interdisciplinar) y liderazgo para dirigir y ejecutar las tareas del laboratorio químico y en instalaciones industriales complejas.
- C29: Capacidad de comunicar de una forma clara y precisa conocimientos y conclusiones aun público tanto especializado como no especializado.
- C30: Capacidad para aprender nuevas técnicas y conocimientos que permitan emprender estudios posteriores con un alto grado de autonomía.
- C31: Desarrollo de habilidades de aprendizaje personal. Adquisición de habilidades en las relaciones interpersonales, liderazgo, creatividad y adaptación a nuevas situaciones.

METODOLOGÍA DEL TRABAJO

- * Revisión de bibliografía disponible sobre el tema del trabajo: las superficies de energía potencial o superficies de Born-Oppenheimer, en concreto, aquellas que describen la reactividad entre especies químicas elementales.
- * Utilizando software específico, emplear superficies de energía potencial para la determinación de propiedades de sustancias estables, así como de intermedios reactivos para moléculas sencillas.
- * Determinar propiedades cinéticas y dinámicas de reacciones químicas elementales a partir del análisis del movimiento de partículas sobre superficies de energía potencial.

BIBLIOGRAFÍA

- * "Superficies de energía potencial y reactividad química." Joaquín Espinosa García, Septem Ediciones, 2001.
- * "Chemical kinetics and reaction dynamics." Paul L. Houston, McGraw-Hill, 2001.

Observaciones: PARA EL GRADO DE QUÍMICA

-TUTORES:

Nombre: Joaquín Espinosa García y José Carlos Corchado Martín-Romo

Área de conocimiento: Química Física

Fecha de aprobación del Consejo del Departamento: 31/10/2012

Vº Bº y Firma del Director del Dpto



Vº Bº y Firma del Tutor

Two handwritten signatures in black ink are written side-by-side.

Decanato de la Facultad de Ciencias