



1

	PROCEDIMIENTO DE GESTIÓN DE LOS TRABAJOS FIN DE ESTUDIOS DE LA FACULTAD DE CIENCIAS DE LA UEX (PR/CL002_FC)	
	Asunto: Anexo I PROPUESTA DE TRABAJO FIN DE GRADO	



ANEXO I: PROPUESTA DE TRABAJO FIN DE GRADO

TÍTULO	MODELACIÓN DE PROCESOS QUÍMICOS MEDIANTE EL USO DE REDES NEURONALES								
GRADO (*)	QUÍMICA								
DEPARTAMENTO RESPONSABLE DE LA OFERTA	EXPRESIÓN GRÁFICA								
TIPO DE TRABAJO (señalar con una cruz el que proceda)									
Teórico	<input type="checkbox"/>	Revisión bibliográfica	<input type="checkbox"/>	Númérico	<input type="checkbox"/>	Informes	<input type="checkbox"/>	Computacional	<input checked="" type="checkbox"/>
Experimental	<input type="checkbox"/>	Proyecto de ingeniería	<input type="checkbox"/>	Proyecto de diseño industrial	<input type="checkbox"/>	Proyecto de naturaleza profesional		<input type="checkbox"/>	
Otros (especifíquese)	<input type="checkbox"/>								
DESCRIPCIÓN (Objetivos, metodología, etc...)									
El trabajo versa sobre la elección de modelos cinéticos o de cualquier naturaleza, relativos a reacciones químicas, y que sean complicados de ajustar mediante las ecuaciones convencionales. Se trata de utilizar la potencia de las redes neuronales para conseguir aproximarse a los resultados experimentales realizados en laboratorio, a fin de aplicarlo en la predicción de los comportamientos a gran escala.									
OBSERVACIONES									
El alumno debe tener conocimientos previos de Matlab o Python, así como cierta inclinación hacia la programación.									
DATOS DEL DIRECTOR/A O DIRECTORES (**)									
APELLIDOS, NOMBRE	Martínez de Salazar Martínez, Enrique								
Área de conocimiento	Proyectos								

* Todos los grados, excepto Ingeniería Química Industrial. Para este grado, usen el Anexo_I_IQI.



**Hasta un máximo de dos directores. Los trabajos que se desarrollen en empresas o instituciones externas deben contar al menos con dos directores: uno pertenecerá a la plantilla de la entidad externa, y el otro será un profesor de la UEx perteneciente al departamento que avala la oferta. Si hay dos tutores de la UEx y uno de ellos no es profesor, deberá especificar el tipo de vinculación con la Universidad.

2

	PROCEDIMIENTO DE GESTIÓN DE LOS TRABAJOS FIN DE ESTUDIOS DE LA FACULTAD DE CIENCIAS DE LA UEX (PR/CL002_FC)	
	Asunto: Anexo I PROPUESTA DE TRABAJO FIN DE GRADO	



ANEXO I: PROPUESTA DE TRABAJO FIN DE GRADO

TÍTULO	ESTUDIO TEÓRICO-EXPERIMENTAL DEL EFECTO DEL DISOLVENTE EN EL ESPECTRO DE ABSORCIÓN DE SUSTANCIAS ORGÁNICAS								
GRADO (*)	GRADO EN QUIMICA								
DEPARTAMENTO RESPONSABLE DE LA OFERTA	INGENIERIA QUÍMICA Y QUÍMICA FÍSICA								
TIPO DE TRABAJO (señalar con una cruz el que proceda)									
Teórico	X	Revisión bibliográfica		Numérico		Informes		Computacional	X
Experimental	X	Proyecto de ingeniería		Proyecto de diseño industrial		Proyecto de naturaleza profesional			
Otros (especifíquese)									
DESCRIPCION (Objetivos, metodología, etc...)									
<p>El trabajo consistirá en la medición experimental del desplazamiento que se produce en la longitud de onda de máxima absorción del espectro electrónico de compuestos orgánicos al modificar el disolvente en que se realiza la medida del espectro. Posteriormente, se intentará reproducir dicho desplazamiento mediante técnicas de simulación por ordenador basadas en métodos de la mecánica cuántica.</p> <p>Los objetivos principales del trabajo serán familiarizar al alumno con los programas más habituales de la química teórica, con técnicas de cálculo de estructura electrónica y promover la capacidad de interpretación de datos experimentales desde una perspectiva teórica.</p>									
OBSERVACIONES									
DATOS DEL DIRECTOR/A O DIRECTORES (**)									
APELLIDOS, NOMBRE	MARTÍN NAVARRO, MARÍA ELENA								
Área de conocimiento	Química Física								
APELLIDOS, NOMBRE	CORCHADO MARTÍN-ROMO, JOSE CARLOS								
Área de conocimiento	Química Física								

	PROCEDIMIENTO DE GESTIÓN DE LOS TRABAJOS FIN DE ESTUDIOS DE LA FACULTAD DE CIENCIAS DE LA UEX (PR/CL002_FC)	
	Asunto: Anexo I PROPUESTA DE TRABAJO FIN DE GRADO	



ANEXO I: PROPUESTA DE TRABAJO FIN DE GRADO

TÍTULO	CAMINANDO SOBRE SUPERFICIES DE ENERGÍA POTENCIAL								
GRADO (*)	GRADO EN QUIMICA								
DEPARTAMENTO RESPONSABLE DE LA OFERTA	INGENIERÍA QUIMICA Y QUIMICA FISICA								
TIPO DE TRABAJO (señalar con una cruz el que proceda)									
Teórico		Revisión bibliográfica	X	Numérico		Informes		Computacional	X
Experimental		Proyecto de ingeniería		Proyecto de diseño industrial		Proyecto de naturaleza profesional			
Otros (especifíquese)									
DESCRIPCION (Objetivos, metodología, etc...)									
<p>OBJETIVOS</p> <ul style="list-style-type: none"> * Llevar a cabo una revisión crítica de la literatura científica reciente sobre la determinación de superficies de energía potencial * Determinar propiedades cinéticas y dinámicas de reacciones químicas elementales a partir del análisis del movimiento de partículas sobre superficies de energía potencial. <p>METODOLOGÍA DEL TRABAJO</p> <ul style="list-style-type: none"> * 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. 									
OBSERVACIONES									
BIBLIOGRAFÍA									
<ul style="list-style-type: none"> * "Superficies de energía potencial y reactividad química." Joaquín Espinosa García, Septem Ediciones, 2001. * "Chemical kinetics and reaction dynamics." Paul L. Houston, McGraw-Hill, 2001. 									
DATOS DEL DIRECTOR/A O DIRECTORES (**)									
APELLIDOS, NOMBRE	ESPINOSA GARCÍA, JOAQUÍN								
Área de conocimiento	Química Física								
APELLIDOS, NOMBRE	CORCHADO MARTÍN-ROMO, JOSE CARLOS								
Área de conocimiento	Química Física								

	PROCEDIMIENTO DE GESTIÓN DE LOS TRABAJOS FIN DE ESTUDIOS DE LA FACULTAD DE CIENCIAS DE LA UEX (PR/CL002_FC)	
	Asunto: Anexo I PROPUESTA DE TRABAJO FIN DE GRADO	



ANEXO I: PROPUESTA DE TRABAJO FIN DE GRADO

TÍTULO	ESTUDIO TEÓRICO DEL EQUILIBRIO CONFORMACIONAL EN PEQUEÑOS DIPÉPTIDOS								
GRADO (*)	GRADO EN QUIMICA								
DEPARTAMENTO RESPONSABLE DE LA OFERTA	INGENIERÍA QUIMICA Y QUIMICA FISICA								
TIPO DE TRABAJO (señalar con una cruz el que proceda)									
Teórico	<input checked="" type="checkbox"/>	Revisión bibliográfica	<input type="checkbox"/>	Númérico	<input type="checkbox"/>	Informes	<input type="checkbox"/>	Computacional	<input checked="" type="checkbox"/>
Experimental	<input type="checkbox"/>	Proyecto de ingeniería	<input type="checkbox"/>	Proyecto de diseño industrial	<input type="checkbox"/>	Proyecto de naturaleza profesional		<input type="checkbox"/>	
Otros (especifíquese)									
DESCRIPCION (Objetivos, metodología, etc...)									
<p>El presente trabajo de fin de Grado trabajo se orienta al estudio teórico de la influencia que el disolvente ejerce sobre el equilibrio conformacional de un dipéptido. Estos pequeños péptidos sirven como modelos donde estudiar la influencia que los grupos laterales y el disolvente tienen sobre sistemas mayores como pueden ser las proteínas y sirven de ayuda a la hora de resolver uno de los problemas fundamentales de la química computacional como es el plegamiento de proteínas.</p> <p>En el estudio se emplearán métodos mecano-cuánticos (MP2, DFT) en la descripción del dipéptido y técnicas de dinámica molecular en la descripción del disolvente. Ambos se combinarán haciendo uso de un método desarrollado por nuestro grupo de investigación y conocido como ASEP/MD, el cual hace uso de una aproximación de campo medio en la descripción de la perturbación generada por el disolvente sobre el volumen ocupado por el soluto.</p>									
OBSERVACIONES									
DATOS DEL DIRECTOR/A O DIRECTORES (**)									
APELLIDOS, NOMBRE	AGUILAR ESPINOSA, MANUEL ÁNGEL								
Área de conocimiento	Química Física								
APELLIDOS, NOMBRE	MARTÍN NAVARRO, MARÍA ELENA								
Área de conocimiento	Química Física								

	PROCEDIMIENTO DE GESTIÓN DE LOS TRABAJOS FIN DE ESTUDIOS DE LA FACULTAD DE CIENCIAS DE LA UEX (PR/CL002_FC)	
	Asunto: Anexo I PROPUESTA DE TRABAJO FIN DE GRADO	

ANEXO I: PROPUESTA DE TRABAJO FIN DE GRADO

TÍTULO	DESARROLLO DE SOFTWARE CIENTÍFICO PARA EL CÁLCULO DE ENERGÍAS LIBRES EN DISOLUCIÓN								
GRADO (*)	GRADO EN QUÍMICA								
DEPARTAMENTO RESPONSABLE DE LA OFERTA	INGENIERÍA QUÍMICA Y QUÍMICA FÍSICA								
TIPO DE TRABAJO (señalar con una cruz el que proceda)									
Teórico	<input checked="" type="checkbox"/>	Revisión bibliográfica	<input type="checkbox"/>	Numérico	<input type="checkbox"/>	Informes	<input type="checkbox"/>	Computacional	<input type="checkbox"/>
Experimental	<input type="checkbox"/>	Proyecto de ingeniería	<input type="checkbox"/>	Proyecto de diseño industrial	<input type="checkbox"/>	Proyecto de naturaleza profesional			<input type="checkbox"/>
Otros (especifica)	<input type="checkbox"/>								
DESCRIPCIÓN (Objetivos, metodología, etc...)									
<p>La energía libre es una magnitud fundamental en el estudio de los procesos en disolución, pues es la que determina el sentido de la evolución de los mismos. Se han propuesto distintos métodos para su cálculo, entre los que destacan "umbrella sampling", "free energy perturbation methods", e "integración termodinámica"</p> <p>El presente trabajo tiene como objetivo fundamental la elaboración de un programa informático que permita el cálculo de energías libres mediante integración termodinámica. Dicho programa se emplearía para el estudio de propiedades termodinámicas de sistemas en disolución utilizando la metodología ASEP/MD, más concretamente se calculará la estabilidad relativa de los diferentes conformeros de pequeños péptidos que sirven como modelo del plegamiento en proteínas.</p>									
OBSERVACIONES									
<p>Durante la realización del trabajo se hará uso de un entorno Linux. Es necesario tener conocimientos básicos de programación en Fortran o C.</p>									
DATOS DEL DIRECTOR/A O DIRECTORES (**)									
APELLIDOS, NOMBRE	AGUILAR ESPINOSA, MANUEL ÁNGEL								
Área de conocimiento	Química Física								
APELLIDOS, NOMBRE	CORCHADO MARTÍN-ROMO, JOSÉ CARLOS								
Área de conocimiento	Química Física								

	PROCEDIMIENTO DE GESTIÓN DE LOS TRABAJOS FIN DE ESTUDIOS DE LA FACULTAD DE CIENCIAS DE LA UEX (PR/CL002_FC)	
	Asunto: Anexo I PROPUESTA DE TRABAJO FIN DE GRADO	

ANEXO I: PROPUESTA DE TRABAJO FIN DE GRADO

TÍTULO	Evaluación Automática de Resultados Numéricos y Experimentales en Química Analítica en la Plataforma de e-Learning DOCTUS								
GRADO (*)	DE QUIMICA								
DEPARTAMENTO RESPONSABLE DE LA OFERTA	QUIMICA ANALITICA								
TIPO DE TRABAJO (señalar con una cruz el que proceda)									
Teórico	<input type="checkbox"/>	Revisión bibliográfica	<input type="checkbox"/>	Númérico	<input type="checkbox"/>	Informes	<input type="checkbox"/>	Computacional	<input checked="" type="checkbox"/>
Experimental	<input type="checkbox"/>	Proyecto de ingeniería	<input type="checkbox"/>	Proyecto de diseño industrial	<input type="checkbox"/>	Proyecto de naturaleza profesional			
Otros (especifíquese)	<input type="checkbox"/>								
DESCRIPCIÓN (Objetivos, metodología, etc...)									
<p>Objetivos:</p> <p>El trabajo de fin de grado propuesto es un proyecto que utilizará la plataforma de e-learning DOCTUS para programar distintas unidades de evaluación de resultados numéricos y experimentales en Química Analítica (1-8). Dicha programación se desarrollará en entorno Mat Lab y/o Excel Se aplicará a resultados analíticos obtenidos en un ejercicio de comparación entre laboratorios analíticos (ejercicios de intercomparación), relacionados con temas abordados en la asignatura optativa <i>Control de Calidad en los Laboratorios Analíticos</i> impartida en 4º curso del Grado de Química. El objetivo principal del proyecto está relacionado con algunas competencias profesionales y transversales que debería adquirir el estudiante tras completar el periodo formativo. Entre ellas destacaríamos que el alumno posea destrezas en el uso de las nuevas tecnologías, así como identificar, resolver y prevenir problemas en su área profesional. Entre las competencias profesionales podríamos destacar: C17: Reconocimiento y análisis de nuevos problemas y planificación de estrategias para su solución tanto en un entorno académico como profesional. C19: Evaluación, interpretación y síntesis de datos. C21: Interpretación de datos derivados de observaciones y medidas en el laboratorio. C24: Utilización de las tecnologías de la información y la comunicación (TICs) más adecuadas en cada situación.</p> <p>Metodología</p> <p>Se utilizará el servidor DOCTUS para analizar los resultados analíticos obtenidos en un ejercicio de comparación entre laboratorios. Dicho servidor se encuentra ubicado en la Escuela de Ingenierías Industriales de la Universidad de Sevilla, teniendo acceso al mismo: http://doctus.us.es/sdocencia/public/index.php El material a elaborar es un programa informático, en el entorno Mat Lab y/o Excel, ejecutable como evaluador y generador aleatorio de problemas individuales, en DOCTUS. Precisamente son estas las características nuevas que posee esta plataforma respecto a la anterior, Google GMS. Con datos de un ejercicio de intercomparación se realizará un análisis estadístico de Youden, implementándolo en la plataforma DOCTUS como programa evaluador de dichos resultados.</p> <p>Bibliografía</p>									

- (1) Muñoz de la Peña, A.; Muñoz de la Peña, D.; Evaluación automática de ejercicios y prácticas de laboratorio de análisis instrumental, *Actualidad Analítica, Boletín de la Sociedad Española de Química Analítica*, 2012, 38,12-13.
- (2) Muñoz de la Peña, A.; González-Gómez, D.; Muñoz de la Peña, D.; Gómez-Estern, F., Sánchez Sequedo, M., Automatic Web-Based Grading System: Application in an Advanced Instrumental Analysis Chemistry Laboratory, *Journal of Chemical Education*, 2013, 90, 308-314.
- (3) Rodríguez Cáceres, M.I., Mora Díez, N., Godoy Caballero, M.P., Muñoz de la Peña, D., González Gómez, D., Muñoz de la Peña, A., An Automatic Grading system for a Laboratory Experiment Class: Kinetic Determination of Furfural as a Parameter of Food Quality, *Chemical Educator*, 2014, 14, 148-52.
- (4) Muñoz de la Peña, A.; Muñoz de la Peña, D.; Godoy Caballero, M.P., González-Gómez, D.; Gómez-Estern, F., Sánchez, C., Automatic Automation and Data Generation for Analytical Chemistry Instrumental Analysis Exercises, *Química Nova*, 2014, 37, 1550-1558.
- (5) Muñoz de la Peña, A.; Muñoz de la Peña, D.; Hurtado-Sánchez, M.C.; Godoy-Caballero, M.P.; Espinosa-Mansilla, A.; Durán-Merás, I., Evaluación Automática de Competencias en un Ejercicio de Intercomparación mediante ANOVA, *Actualidad Analítica, Boletín de la Sociedad Española de Química Analítica*, 2015, 51,1550-1558.
- (6) Godoy Caballero, M.P.; Hurtado Sánchez, M.C.; Durán Merás, I., Muñoz de la Peña, D.; Muñoz de la Peña, Teaching ANOVA in a laboratory class: Emulating an inter-laboratory exercise using a simple liquid chromatographic practice, *Chemical Educator*, 2016, 22, 55-59.
- (7) Monago-Maraña, O.; Martín-Tornero E.; Muñoz de la Peña, D.; Galeano-díaz, T., Muñoz de la Peña, A., Automatic Evaluation of slope comparison tests in Analytical chemistry e-learning classes, *Chemical Educator*, 2020, 25, 169-174.
- (8) Airado-rodríguez, D., Muñoz de la Peña, D.; Durán-Merás, I.; Domínguez Manzano, J.; Muñoz de la Peña, A., new alternatives to academic delivery: Implementation of Analytical Chemistry quality assessment exercises in an e-learning environment, *Journal of Chemical Education*, 2022, 99, 3424-3434.

OBSERVACIONES

Observaciones: Recomendable haber cursado la asignatura Optativa Control de Calidad en los Laboratorios Analíticos.

DATOS DEL DIRECTOR/A O DIRECTORES (**)

APELLIDOS, NOMBRE	Arsenio Muñoz de la Peña
--------------------------	--------------------------

Área de conocimiento	Química Analítica
-----------------------------	-------------------

	PROCEDIMIENTO DE GESTIÓN DE LOS TRABAJOS FIN DE TITULACIÓN DE LA FACULTAD DE CIENCIAS DE LA UEX (PR/CL002_FC)	
	Asunto: Anexo I PROPUESTA DE TRABAJO FIN DE GRADO	



ANEXO I PROPUESTA DE TRABAJO FIN DE GRADO

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

-GRADO: QUÍMICA

CARACTERÍSTICAS DEL TRABAJO							
TÍTULO	Búsqueda bibliográfica de sideróforos						
TIPO DE TRABAJO (señalar con una cruz el que proceda)							
Teórico	Revisión bibliográfica	X	Numérico	Informes	Computacional		
Experimental	Proyectos de diseño industrial (tipo A)		Estudios e informes técnicos (tipo B)	Trabajos de investigación o de investigación y desarrollo (tipo C)			
Otros (especifíquese)							
DESCRIPCIÓN (Objetivos, metodología, etc...)							
<p>Estos ligandos se sintetizan por parte de los microorganismos como respuesta a bajos niveles de Fe y son segregados para que desempeñen su función. Unen y solubilizan Fe(III) de alto spin formando complejo de coordinación aproximadamente octaédrico que vuelven a entrar en la célula por los lugares específicos que hay en su superficie. Se encargan de proporcionar Fe para el transporte, almacenamiento o incorporación en proteínas y actúan por procesos de reducción/protonación, por ejemplo en las membranas de los receptores.</p>							
OBSERVACIONES							
<p>Este trabajo bibliográfico está orientado a alumnos/as del grado en Química con conocimientos tanto de Química de Coordinación como de Bioinorgánica.</p>							
DATOS DEL TUTOR O TUTORES (*)							
APELLIDOS, NOMBRE	Barros García, Fernando José						
Área de conocimiento	Química Inorgánica						
APELLIDOS, NOMBRE							
Área de conocimiento							

*(Los trabajos que se desarrollen en empresas o instituciones externas deben contar al menos con dos tutores: uno pertenecerá a la plantilla de la entidad externa, y el otro será un profesor de la UEx perteneciente al departamento que avala la oferta). Si hay más de un tutor de la UEx y uno de ellos no es profesor, deberá especificar el tipo de vinculación con la Universidad.

	PROCEDIMIENTO DE GESTIÓN DE LOS TRABAJOS FIN DE ESTUDIOS DE LA FACULTAD DE CIENCIAS DE LA UEX (PR/CL002_FC)	
	Asunto: Anexo I PROPUESTA DE TRABAJO FIN DE GRADO	

ANEXO I: PROPUESTA DE TRABAJO FIN DE GRADO



TÍTULO	Producción de compuestos comerciales desde CO ₂ mediante procesos fotocatalíticos						
GRADO (*)	Grado en Química						
DEPARTAMENTO RESPONSABLE DE LA OFERTA	Química Orgánica e inorgánica						
TIPO DE TRABAJO (señalar con una cruz el que proceda)							
Teórico		Revisión bibliográfica		Numérico		Informes	Computacional
Experimental	X	Proyecto de ingeniería		Proyecto de diseño industrial		Proyecto de naturaleza profesional	
Otros (especificarse)							
DESCRIPCIÓN (Objetivos, metodología, etc...)							
<p>El alumno se centrará en el proceso para obtener metanol usando CO₂ como reactivo de partida, un contaminante atmosférico, con una doble finalidad, reducción de las emisiones de CO₂ y obtención de un producto comercial. Este proceso se prevé que tenga un gran impacto en la próxima década debido a las restricciones gubernamentales en cuanto la emisión de gases de efecto invernadero. Típicamente, la transformación de CO₂ requiere un aporte energético y reactivos químicos, lo que hace que la emisión de CO₂ sea más económica que su transformación. Este trabajo busca evaluar dicha reacción química mediante el empleo de catalizadores heterogéneos, usando luz como aporte energético y agua como reactivo, lo que permitiría reducir el costo del proceso y favorecer su implantación industrial. La metodología del trabajo fin de grado constará de tres partes;</p> <ul style="list-style-type: none"> • Una pequeña revisión bibliográfica de dicho proceso. • Diseño y cálculo del sistema necesario para llevar el proceso a producción industrial. • Obtención de los parámetros y datos necesarios de forma experimental. <p>Una vez completada la metodología de trabajo el alumno redactará el informe final del trabajo fin de grado de acuerdo a las normas de la Universidad de Extremadura.</p>							

OBSERVACIONES

El trabajo experimental se realizará en las instalaciones del Departamento de Química Orgánica e Inorgánica, y en las instalaciones del Instituto universitario IACYS, en el Edificio de los Institutos Universitarios

DATOS DEL DIRECTOR/A O DIRECTORES (**)

APELLIDOS, NOMBRE	Vicente Montes Jiménez
Área de conocimiento	Química Orgánica
APELLIDOS, NOMBRE	
Área de conocimiento	

	PROCEDIMIENTO DE GESTIÓN DE LOS TRABAJOS FIN DE ESTUDIOS DE LA FACULTAD DE CIENCIAS DE LA UEX (PR/CL002_FC)	
	Asunto: Anexo I PROPUESTA DE TRABAJO FIN DE GRADO	



ANEXO I PROPUESTA DE TRABAJO FIN DE GRADO

-DEPARTAMENTO DE LA UEX RESPONSABLE DE LA OFERTA: Química Orgánica e Inorgánica

-GRADO: Química

CARACTERÍSTICAS DEL TRABAJO							
TÍTULO	Estudio mediante la Base de datos cristalográfica de Cambridge de parámetros estructurales de compuestos de coordinación.						
TIPO DE TRABAJO (señalar con una cruz el que proceda)							
Teórico	Revisión bibliográfica	X	Númerico	Informes	Computacional		
Experimental	Proyectos de diseño industrial (tipo A)		Estudios e informes técnicos (tipo B)	Trabajos de investigación o de investigación y desarrollo (tipo C)			
Otros (especificuese)							
DESCRIPCIÓN (Objetivos, metodología, etc...)							
<p>Los complejos pentacoordinados de iones metálicos del bloque d presentan geometrías de coordinación intermedias entre bipirámide trigonal y pirámide cuadrada. El tipo y grado de distorsión es muy variado ya que como en el caso del ion Cu(II) sus complejos intercambian ambas geometrías sin un aporte muy grande de energía.</p> <p>En este trabajo se aplicará un método sencillo para, a partir de análisis de los datos estructurales obtenidos de la Base de datos cristalográfica de Cambridge, establecer el mecanismo de Berry por el cual una serie de complejos del tipo [M(ligando bidentado)₂(ligando monodentado)]y geometría de bipirámide trigonal se distorsionan hacia pirámide cuadrada.</p> <p>El plan de trabajo puede desglosarse en las siguientes tareas:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1- Selección del ion metálico y ligandos bidentados sobre los que se van a realizar el estudio. 2- Búsqueda de complejos pentacoordinados y geometría de bipirámide trigonal en la Base cristalográfica de Cambridge. 3- Obtención de datos estructurales de esos compuestos (distancias y ángulos de enlace). 4- Análisis de los datos y obtención de conclusiones. <p>El objetivo del trabajo es deducir que factores estructurales influyen en el mecanismo de distorsión seguido por un complejo con geometría de bipirámide trigonal hacia pirámide cuadrada.</p>							
OBSERVACIONES							



DATOS DEL DIRECTOR/A O DIRECTORES (*)	
APELLIDOS, NOMBRE	LUNA GILES, FRANCISCO
Área de conocimiento	QUÍMICA INORGÁNICA
APELLIDOS, NOMBRE	
Área de conocimiento	

	PROCEDIMIENTO DE GESTIÓN DE LOS TRABAJOS FIN DE ESTUDIOS DE LA FACULTAD DE CIENCIAS DE LA UEX (PR/CL002_FC)	
	Asunto: Anexo I PROPUESTA DE TRABAJO FIN DE GRADO	

ANEXO I: PROPUESTA DE TRABAJO FIN DE GRADO

TÍTULO	Implicación del Furano en Escenarios Prebióticos						
GRADO (*)	Grado en Química						
DEPARTAMENTO RESPONSABLE DE LA OFERTA	Química Orgánica e Inorgánica						
TIPO DE TRABAJO (señalar con una cruz el que proceda)							
Teórico		Revisión bibliográfica		Numérico		Informes	Computacional
Experimental	X	Proyecto de ingeniería		Proyecto de diseño industrial		Proyecto de naturaleza profesional	
Otros (especificuese)							
DESCRIPCIÓN (Objetivos, metodología, etc...)							
<p>La química prebiótica se centra en el estudio de la formación de biomoléculas a partir de moléculas orgánicas sencillas. Hasta el momento solo unas pocas moléculas han sido consideradas prebióticas. Considerando que el inicio de la química es en el medio difuso del espacio, muchas otras moléculas a parte de las prebióticas se pueden formar y llegar a planetas rocosos tipo Tierra durante la formación de los sistemas solares.</p> <p>Bajo esta premisa y considerando que estudios previos demuestran que la formación de furano es factible en las condiciones del medio difuso, en este trabajo intentaremos evaluar la posible influencia de este heterociclo en escenarios prebióticos estudiando su reactividad con glioxal, posible iniciador de la formación de azúcares y pseudoazúcares.</p> <p>La metodología a seguir será poner reacciones entre estos dos reactivos en agua en distintas proporciones, condiciones de pH y temperatura para posteriormente evaluar su reactividad basándonos en la interpretación de espectros de RMN del crudo de reacción.</p>							
OBSERVACIONES							
DATOS DEL DIRECTOR/A O DIRECTORES (**)							
APELLIDOS, NOMBRE	García de la Concepción, Juan						
Area de conocimiento	Química Orgánica						

* Todos los grados, excepto Ingeniería Química Industrial. Para este grado, usen el Anexo_I_IQI.

	PROCEDIMIENTO DE GESTIÓN DE LOS TRABAJOS FIN DE ESTUDIOS DE LA FACULTAD DE CIENCIAS DE LA UEX (PR/CL002_FC)	
	Asunto: Anexo I PROPUESTA DE TRABAJO FIN DE GRADO	

ANEXO I: PROPUESTA DE TRABAJO FIN DE GRADO

TÍTULO	Catalizadores para procesos más eficientes y sostenibles de síntesis de amoníaco								
GRADO (*)	Grado en Química								
DEPARTAMENTO RESPONSABLE DE LA OFERTA	Química Orgánica e Inorgánica								
TIPO DE TRABAJO (señalar con una cruz el que proceda)									
Teórico	<input type="checkbox"/>	Revisión bibliográfica	<input checked="" type="checkbox"/>	Númerico	<input type="checkbox"/>	Informes	<input type="checkbox"/>	Computacional	<input type="checkbox"/>
Experimental	<input type="checkbox"/>	Proyecto de ingeniería	<input type="checkbox"/>	Proyecto de diseño industrial	<input type="checkbox"/>	Proyecto de naturaleza profesional			<input type="checkbox"/>
Otros (especifíquese)	<input type="checkbox"/>								
DESCRIPCIÓN (Objetivos, metodología, etc...)									
<p>El amoníaco es un producto químico muy demandado, debido a su uso en la agricultura y a su potencial como vector químico para el almacenamiento y el transporte de energías renovables. En la actualidad, la síntesis de amoníaco tiene lugar a través del proceso de Haber-Bosch con catalizadores de hierro. Se consume entre el 1% y el 2% de la producción mundial de energía y produce el 1% de las emisiones totales de carbono. Incluso con los catalizadores de segunda generación basados en Ru, recientemente introducidos y con un rendimiento superior al de los catalizadores comerciales basados en Fe, todavía hay lugar para la mejora utilizando materiales avanzados. Los catalizadores de óxidos metálicos y de carbono con soporte de Ru promovidos por metales alcalinos y alcalinotérreos atrajeron la atención en la etapa inicial y se estudiaron ampliamente para la síntesis de amoníaco en el siglo XX. Hasta hace poco, los materiales avanzados como electruros, hidruros, nitruros, óxidos y óxido-hidruros-nitruros estudiados como soporte y componente activo del catalizador consiguieron condiciones de reacción más suaves para la síntesis de amoníaco.</p> <p>En este TFG se hará una revisión de estos procesos de conversión y de los distintos catalizadores utilizados haciendo hincapié en los últimos avances en el campo.</p>									
OBSERVACIONES									
DATOS DEL DIRECTOR/A O DIRECTORES (**)									
APELLIDOS, NOMBRE	VINUELAS ZAHINOS, EMILIO								
Área de conocimiento	Química Inorgánica								
APELLIDOS, NOMBRE	<input type="text"/>								
Área de conocimiento	<input type="text"/>								