



PROCEDIMIENTO DE GESTIÓN DE LOS TRABAJOS FIN DE TITULACIÓN DE LA FACULTAD DE CIENCIAS DE LA UEX (PR/CL002_FC)



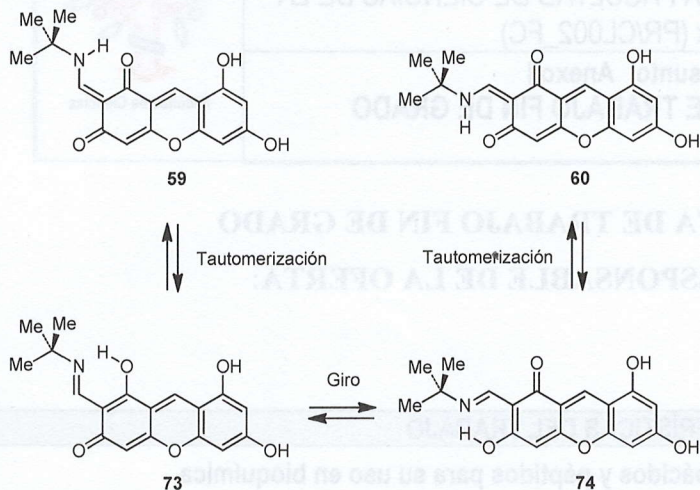
Asunto: Anexo I
PROPUESTA DE TRABAJO FIN DE GRADO

ANEXO I PROPUESTA DE TRABAJO FIN DE GRADO

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

-GRADO: en Enología

CARACTERÍSTICAS DEL TRABAJO									
TÍTULO	Señalización molecular de aminoácidos y péptidos para su uso en bioquímica								
TIPO DE TRABAJO (señalar con una cruz el que proceda)									
Teórico	X	Investigación bibliográfica	X	Numérico		Informes		Computacional	X
Experimental	X	Proyectos de diseño industrial (tipo A)		Estudios e informes técnicos (tipo B)		Trabajos de investigación o de investigación y desarrollo (tipo C)			X
Otros (especificúese)									
DESCRIPCIÓN (Objetivos, metodología, etc...)									
<p>Recientemente hemos comprobado que la reacción del 2,4,6-trihidroxibenzaldehído en disolventes hidroxílicos (agua, metanol, etanol, etc.) genera bases de Schiff derivadas del xanteno. Estos compuestos tienen estructura de enamina y se presentan como dos isómeros interconvertibles a temperatura ambiente. En el esquema se expone esta reacción para el caso de la terc-butilamina.</p> <p>No existen antecedentes de esta reacción. La reacción es totalmente general, transcurre a temperatura ambiente y sin necesidad de catalizadores; es decir, en condiciones fisiológicas. Además, estos compuestos son fluorescentes, lo que los hace ideales para llevar a cabo señalizaciones moleculares en moléculas que porten grupos NH₂, como las proteínas y polipéptidos.</p> <p>El trabajo a desarrollar consistirá en obtener derivados xanténicos mediante esta reacción de aminoácidos naturales y sus derivados, así como de dipéptidos y tripéptidos sencillos para explorar la viabilidad de señalización en proteínas y polipéptidos naturales. Tras la síntesis, se llevará a cabo un estudio estructural detallado mediante las técnicas espectroscópicas ultravioleta-visible, de infrarrojo por transformada de Fourier, de resonancia magnética nuclear de protones, carbono-13 y nitrógeno-15 y de espectrometría de masas de alta resolución. Después se estudiarán las propiedades fluorescentes de estos compuestos.</p> <p>Durante el trabajo se adquirirán conocimientos sobre el trabajo de síntesis en el laboratorio, determinación estructural mediante la interpretación de datos espectroscópicos, cálculos computacionales de alto nivel mediante programas de mecánica cuántica, búsquedas bibliográficas y metodología sobre la investigación científica.</p> <p>Los resultados se publicarán en una revista científica de reconocida solvencia.</p>									



OBSERVACIONES

DATOS DEL TUTOR O TUTORES (*)

APELLIDOS, NOMBRE	PALACIOS ALBARRAN, JUAN CARLOS
Área de conocimiento	QUÍMICA ORGÁNICA
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.

Fecha de aprobación del Consejo del Departamento: 9 de noviembre de 2020

Vº Bº y Firma del Director del Dpto

Vº Bº y Firma del Tutor/es

Decanato de la Facultad de Ciencias

	PROCEDIMIENTO DE GESTIÓN DE LOS TRABAJOS FIN DE TITULACIÓN DE LA FACULTAD DE CIENCIAS DE LA UEX (PR/CL002_FC)	 Facultad de Ciencias
	Asunto: PROPUESTA DE TRABAJO FIN DE GRADO (ANEXO I) Curso 2020-21	

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

-TÍTULO DEL TRABAJO: Empleo de materiales carbonosos nanoestructurados para la eliminación de contaminantes en aguas

- CARACTERÍSTICAS DEL TRABAJO FIN DE GRADO

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

Teórico	Revisión e investigación bibliográfica	<input checked="" type="checkbox"/>	Numérico	Informes	
Proyectos de diseño industrial (Tipo A)	Estudios e informes técnicos (Tipo B)		Computacional	Experimental	
Trabajos de investigación o de investigación y desarrollo (Tipo C)	Otros (especificar)				

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

Recientemente se ha generado un gran interés en la comunidad científica por la preparación de materiales carbonosos nanoestructurados con el fin de su utilización en la eliminación de contaminantes en aguas. Por todo esto es necesario realizar una revisión bibliográfica para ordenar y clarificar la información disponible hasta estos momentos.

Titulación: Grado en Enología

Observaciones:

-TUTOR/ES:

Nombre: Maria F. Alexandre Franco, Carmen Fernández González

Área de conocimiento: Química Inorgánica



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: Desarrollo de software científico para el cálculo de energías libres en disolución

- 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		Otros (especificar)	

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

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”

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.

Titulación: Grado en Química y Grado en Enología

Observaciones: Durante la realización del trabajo se hará uso de un entorno Linux. Es necesario tener conocimientos básicos de programación en Fortran o C.

-TUTORES:

Nombre: Manuel Ángel Aguilar Espinosa y José Carlos Corchado Martín-Romo

Área de conocimiento: Química Física

Fecha de aprobación del Consejo del Departamento:

4/11/2020



Vº Bº y Firma del Director del Dpto

Vº Bº y Firma del Tutor

Decanato de la Facultad de Ciencias