



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:

Departamento de química Orgánica e Inorgánica

-GRADO: Grado en Química

CARACTERÍSTICAS DEL TRABAJO							
TÍTULO	Estudios de cristalización bajo condiciones lejos del equilibrio termodinámico: potencialidad prebiótica						
TIPO DE TRABAJO (señalar con una cruz el que proceda)							
Teórico		Investigación bibliográfica		Númérico		Informes	Computacional
Experimental	X	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><u>Introducción:</u></p> <p>La química prebiótica o química del origen de la vida comprende multitud de hipótesis de trabajo y simulaciones de reactividad que se suponen pudieron tener lugar en la Tierra primigenia o en cuerpos interestelares, desde cometas o meteoritos a galaxias en formación. Junto con el origen de las primeras biomoléculas se plantea también otro gran interrogante que implica el origen de la homociralidad molecular; es decir, el hecho que sustancias ópticamente activas como los aminoácidos o los carbohidratos sólo existen en la naturaleza en una forma enantiomérica. Se han propuesto numerosos mecanismos capaces de justificar lo anterior, aunque ninguno es obviamente concluyente. En todo caso, los procesos que favorecen condiciones lejos del equilibrio termodinámico y por tanto bajo control cinético, parecen ser una condición necesaria para la ruptura de simetría, y por ende para la aparición de las primeras formas de vida que pudieron integrar procesos protometabólicos, por ejemplo.</p> <p>En este trabajo fin de grado se proponen una serie de experimentos sencillos, en procesos abióticos, que implican cristalización de moléculas o sustancias quirales en las condiciones anteriormente mencionadas.</p> <p><u>Objetivos:</u></p> <ul style="list-style-type: none">-Puesta a punto bibliográfica de estudios previos en cristalización abiótica de compuestos quirales.-Explorar algunas condiciones lejos del equilibrio sobre cristales quirales y moléculas ópticamente activas.							

Metodología:

-Se hará uso de cristalizaciones en geles que, por su propia naturaleza, ofrecen rupturas de equilibrio. Esto se extenderá también a geles inherentemente quirales que podrían favorecer además la ruptura de simetría molecular.

-Empleo de reacciones oscilantes como medios que alteran el equilibrio termodinámico.

-Evaluación de la quiralidad resultante mediante métodos quirópticos y difracción de rayos X.

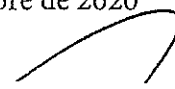
OBSERVACIONES

DATOS DEL TUTOR O TUTORES (*)

APELLIDOS, NOMBRE	Cintas Moreno, Pedro
Área de conocimiento	Química Orgánica
APELLIDOS, NOMBRE	Babiano Caballero, Reyes
Área de conocimiento	Química Orgánica

*(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



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)



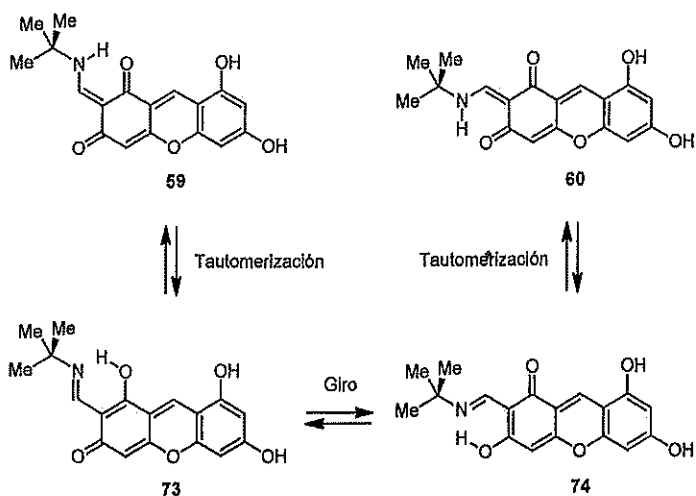
Asunto: Anexo I
PROPUESTA DE TRABAJO FIN DE GRADO

ANEXO I PROPUESTA DE TRABAJO FIN DE GRADO

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

-GRADO: en Química

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

	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		Métodos avanzados para la eliminación de pesticidas.					
TIPO DE TRABAJO (señalar con una cruz el que proceda)							
Teórico		Investigación bibliográfica		Numérico		Informes	Computacional
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 (especifíquese)							
DESCRIPCIÓN (Objetivos, metodología, etc...)							
<p>El uso de pesticidas es inevitable si se desea mantener una alta producción agrícola con un coste moderado de los alimentos, así como evitar plagas que podrían afectar a nuestra salud. Pero el inconveniente de estos productos es su toxicidad en algunas ocasiones.</p> <p>En este proyecto se van a eliminar pesticidas de disoluciones acuosas mediante dos metodologías. Una es la degradación de estos compuestos mediante fotocatalisis catalizada heterogéneamente por óxido de titanio (IV). Y otra, el uso de nuevos adsorbentes preparados mediante carbonización hidrotermal. El objetivo final es conseguir la disminución de los efectos indeseados de los pesticidas sobre el medio ambiente.</p>							
OBSERVACIONES							
<p>El trabajo experimental podrá realizarse tanto en Badajoz (Facultad de Ciencias) como en las dependencias del departamento de Química Orgánica e Inorgánica en el Campus de Cáceres.</p>							
DATOS DEL TUTOR O TUTORES (*)							
APELLIDOS, NOMBRE		Durán Valle, Carlos Javier					
Área de conocimiento		Química Inorgánica					

APELLIDOS, NOMBRE	López-Coca Martín, Ignacio
Área de conocimiento	Química Orgánica

*(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

Decanato de la Facultad de Ciencias



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

ANEXO 1
PROPUESTA DE TRABAJO FIN DE GRADO

-DEPARTAMENTO RESPONSABLE DE LA UEX Y/O ENTIDAD EXTERNA:

Ingeniería Química y Química Física

-TÍTULO DEL TRABAJO: Estudio teórico del equilibrio conformacional en pequeños dipéptidos

- CARACTERÍSTICAS DEL TRABAJO FIN DE GRADO

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

Teórico		Revisión e investigación bibliográfica		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)	X	Otros (especificar)					

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

El presente trabajo de fin de Grado trabajo se orienta al estudio teórico de la influencia que el disolvente ejerce sobre el equilibrio conformacional del dipéptido de glicina. 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.

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.

Titulación: Grado en Química
Observaciones:


-TUTOR/ES*:

María Elena Martín Navarro

Manuel Ángel Aguilar Espinosa

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

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

Involucrar a los estudiantes en la tarea intelectualmente estimulante y satisfactoria del proceso de aprendizaje.

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.

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

Interpretar las estructura atómica y los principios de química cuántica.

Identificar las características de los diferentes estados de la materia y las teorías empleadas para describirlos.

Diferenciar los tipos principales de reacción química. Principios de termodinámica, cinética y electroquímica.

Asimilar la relación entre propiedades macroscópicas y propiedades de átomos y moléculas individuales.

Conocimiento de una lengua extranjera (preferentemente inglés).

Utilización de las tecnologías de la información y la comunicación (TIC's) más adecuadas en cada situación.

Capacidad de relación de la Química con otras disciplinas.

Capacidad de:

- a) Utilización correcta del método de inducción y generación de nuevas ideas.
 - b) Análisis y síntesis.
 - c) Organización y planificación.
 - d) Trabajo en un contexto internacional.
 - e) Expresión tanto oral como escrita.
 - f) Razonamiento crítico. Resolución de problemas.
 - g) Toma de decisiones.
 - h) Trabajo en equipo (también de carácter interdisciplinar) y liderazgo para dirigir y ejecutar las tareas del laboratorio químico y en instalaciones industriales complejas.
- Capacidad de comunicar de una forma clara y precisa conocimientos y conclusiones a un público tanto especializado como no especializado.
- 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.

Titulación: GRADO EN QUÍMICA

Observaciones:

-TUTORES:

Nombre: Joaquín Espinosa García 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

ANEXO 1 PROPUESTA DE TRABAJO FIN DE GRADO

-DEPARTAMENTO DE LA UEX RESPONSABLE DE LA OFERTA: INGENIERÍA QUÍMICA Y QUÍMICA FÍSICA

-TÍTULO DEL TRABAJO: DETERMINACIÓN TEÓRICO-EXPERIMENTAL DEL EFECTO DEL DISOLVENTE EN EL ESPECTRO DE ABSORCIÓN DE SUSTANCIAS COLOREADAS

- 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 trabajo consistirá en la medición experimental del desplazamiento que se produce en la longitud de onda de máxima adsorción del espectro UV de una sustancia coloreada 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.

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.

Titulación: Grado en Química

Observaciones:

-TUTORES:

Nombre: José Carlos Corchado Martín-Romo, María Luz Sánchez Mendoza, Jorge Antonio Sansón Martín y M^a Elena Martín Navarro

Área de conocimiento: Química Física

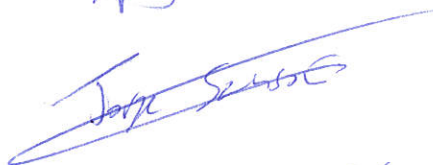
Fecha de aprobación del Consejo del Departamento:

4/11/2020

Vº Bº y Firma del Director del Dpto



Vº Bº y Firma del Tutor



Decanato de la Facultad de Ciencias

ANEXO 1
PROPUESTA DE TRABAJO FIN DE GRADO

-DEPARTAMENTO RESPONSABLE DE LA UEX Y/O ENTIDAD EXTERNA:

Ingeniería Química y Química Física

-TÍTULO DEL TRABAJO: Estudio teórico del equilibrio conformacional en pequeños dipéptidos

- CARACTERÍSTICAS DEL TRABAJO FIN DE GRADO

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

Teórico		Revisión e investigación bibliográfica		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)	X	Otros (especificar)					

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

El presente trabajo de fin de Grado trabajo se orienta al estudio teórico de la influencia que el disolvente ejerce sobre el equilibrio conformacional del dipéptido de glicina. 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.

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.

Titulación: Grado en Química
Observaciones:


-TUTOR/ES*:

María Elena Martín Navarro

Manuel Ángel Aguilar Espinosa

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

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

Involucrar a los estudiantes en la tarea intelectualmente estimulante y satisfactoria del proceso de aprendizaje.

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.

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

Interpretar la estructura atómica y los principios de química cuántica.

Identificar las características de los diferentes estados de la materia y las teorías empleadas para describirlos.

Diferenciar los tipos principales de reacción química. Principios de termodinámica, cinética y electroquímica.

Asimilar la relación entre propiedades macroscópicas y propiedades de átomos y moléculas individuales.

Conocimiento de una lengua extranjera (preferentemente inglés).

Utilización de las tecnologías de la información y la comunicación (TIC's) más adecuadas en cada situación.

Capacidad de relación de la Química con otras disciplinas.

Capacidad de:

- a) Utilización correcta del método de inducción y generación de nuevas ideas.
 - b) Análisis y síntesis.
 - c) Organización y planificación.
 - d) Trabajo en un contexto internacional.
 - e) Expresión tanto oral como escrita.
 - f) Razonamiento crítico. Resolución de problemas.
 - g) Toma de decisiones.
 - h) Trabajo en equipo (también de carácter interdisciplinar) y liderazgo para dirigir y ejecutar las tareas del laboratorio químico y en instalaciones industriales complejas.
- Capacidad de comunicar de una forma clara y precisa conocimientos y conclusiones a un público tanto especializado como no especializado.
- 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.

Titulación: GRADO EN QUÍMICA

Observaciones:

-TUTORES:

Nombre: Joaquín Espinosa García 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

ANEXO 1 PROPUESTA DE TRABAJO FIN DE GRADO

-DEPARTAMENTO DE LA UEX RESPONSABLE DE LA OFERTA: INGENIERÍA QUÍMICA Y QUÍMICA FÍSICA

-TÍTULO DEL TRABAJO: DETERMINACIÓN TEÓRICO-EXPERIMENTAL DEL EFECTO DEL DISOLVENTE EN EL ESPECTRO DE ABSORCIÓN DE SUSTANCIAS COLOREADAS

- 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 trabajo consistirá en la medición experimental del desplazamiento que se produce en la longitud de onda de máxima adsorción del espectro UV de una sustancia coloreada 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.

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.

Titulación: Grado en Química

Observaciones:

-TUTORES:

Nombre: José Carlos Corchado Martín-Romo, María Luz Sánchez Mendoza, Jorge Antonio Sansón Martín y M^a Elena Martín Navarro

Área de conocimiento: Química Física

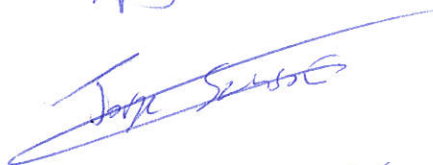
Fecha de aprobación del Consejo del Departamento:

4/11/2020



Vº Bº y Firma del Director del Dpto



Vº Bº y Firma del Tutor



Decanato de la Facultad de Ciencias

	PROCEDIMIENTO DE GESTIÓN DE LOS TRABAJOS FIN DE TITULACIÓN DE LA FACULTAD DE CIENCIAS DE LA UEx (PR/CL002_FC)	 Facultad de Ciencias
	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:

-GRADO: QUÍMICA

CARACTERÍSTICAS DEL TRABAJO					
TÍTULO	Análisis de compuestos bioactivos en la industria olivarera				
TIPO DE TRABAJO (señalar con una cruz el que proceda)					
Teórico		Investigación bibliográfica		Numérico	
				Informes	Computacional
Experimental	x	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...)					
Desarrollo de métodos voltamperométricos para la determinación de compuestos bioactivos en aceites, aguas de lavado de aceituna, alpeorujo.... para conocer el contenido de fenoles totales en cada paso de la cadena de producción del aceite de oliva Metodología: <ol style="list-style-type: none"> 1. Revisión bibliográfica 2. Estudios electroanalíticos previa microextracción dispersiva en aceite de oliva para análisis de fenoles 3. Aplicación de los métodos a pasta de aceituna, aguas de lavado y aceite final 4. Conclusiones acerca de la pérdida de fenoles en la cadena de producción de aceite de oliva 					
OBSERVACIONES					
DATOS DEL TUTOR O TUTORES (*)					
APELLIDOS, NOMBRE	Agustina Guiberteau Cabanillas				
Área de conocimiento	Química Analítica				
APELLIDOS, NOMBRE	Manuel Alejandro Martínez Cañas y Jacinto Jesús Sánchez Casas (CICYTEX). INTAEX				
Área de conocimiento	CICYTEX				

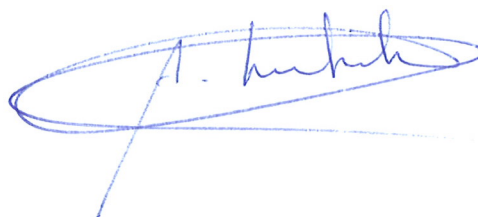
*(Los trabajos que se desarrollen en empresas o instituciones externas deben contar al menos con dos tutores: uno pertenecerá a la plantilla de la entidad externa, y el otro será un profesor de la UEx perteneciente al departamento que avala la oferta). Si hay más de un tutor de la UEx y uno de ellos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

Fecha de aprobación del Consejo del Departamento:



V° B° y Firma del director del Dpto



V° B° 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 Analítica

-TÍTULO DEL TRABAJO:

Optimización mediante extracción en fase sólida del pretratamiento de muestras de diferente naturaleza para el análisis de filtros solares

- CARACTERÍSTICAS DEL TRABAJO FIN DE GRADO

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

Teórico	Revisión e investigación bibliográfica X	Numérico	Informes
Proyectos de diseño industrial (Tipo A)	Estudios e informes técnicos (Tipo B)	Computacional	Experimental X
Trabajos de investigación o de investigación y desarrollo (Tipo C)	Otros (especificar)		

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

El objetivo principal de este trabajo es iniciar al alumno en la sistemática del trabajo de investigación mediante la realización de un trabajo bibliográfico experimental que le permita alcanzar las competencias del Trabajo Fin de Grado en Química. Para ello, se pretende utilizar diferentes técnicas instrumentales y separativas para llevar a cabo la optimización del pretratamiento de las muestras para la cuantificación y control de filtros solares de diferente naturaleza. Los estudios iniciales se llevarán a cabo utilizando las técnicas de espectrofotometría y cromatografía líquida de alta resolución con detección fotométrica y fluorimétrica en su caso.

Metodología:

1. Estudio bibliográfico sobre los filtros solares permitidos y no permitidos por la legislación vigente.
2. Estudios de retención y purificación de los analitos mediante la utilización

preferentemente de extracción en fase sólida y ensayando diferentes adsorbentes.

3. Seguimiento espectrofotométrico y cromatográfico de los ensayos realizados mediante detección fotométrica.
4. Aplicación al análisis de muestras medioambientales u otras que potencialmente podrían verse afectadas por dichos compuestos.

Titulación: **Grado en Química**

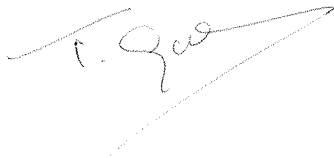
Observaciones:

-TUTOR/ES:

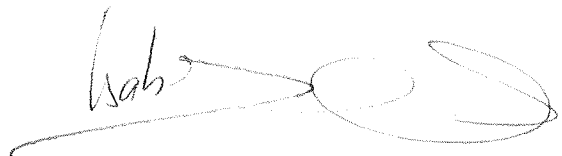
Nombre: Dra. Isabel Durán Martín-Merás y Dra. Anunciación Espinosa Mansilla

Área de conocimiento: Química Analítica

Fecha de aprobación del Consejo del Departamento:





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: Anexo I PROPUESTA DE TRABAJO FIN DE GRADO	

ANEXO I PROPUESTA DE TRABAJO FIN DE GRADO

-DEPARTAMENTO DE LA UEX RESPONSABLE DE LA OFERTA:

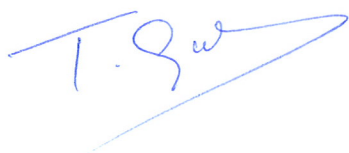
-GRADO: Química

CARACTERÍSTICAS DEL TRABAJO							
TÍTULO		Caracterización de productos del tomate mediante señales electroanalíticas					
TIPO DE TRABAJO (señalar con una cruz el que proceda)							
Teórico		Investigación bibliográfica		Numérico		Informes	Computacional
Experimental	x	Proyectos de diseño industrial (tipo A)		Estudios e informes técnicos (tipo B)		Trabajos de investigación o de investigación y desarrollo (tipo C)	
Otros (especifica)							
DESCRIPCIÓN (Objetivos, metodología, etc...)							
<p>Objetivos: Desarrollo de métodos para el análisis electroanalíticos que permitan la caracterización de productos derivados del tomate</p> <p>Metodología:</p> <ul style="list-style-type: none"> -Revisión bibliográfica -Estudios electroanalíticos de la señal CV de productos derivados del tomate utilizando diferentes electrodos -Perfil electroquímico del tomate seleccionando patrón o patrones de posibles compuestos presentes en el tomate para utilizar la señal completa y poder caracterizarlo -Conclusiones a partir de resultados obtenidos 							
OBSERVACIONES							
DATOS DEL TUTOR O TUTORES (*)							
APELLIDOS, NOMBRE	Agustina Guiberteau Cabanillas						
Área de conocimiento	Química Analítica						
APELLIDOS, NOMBRE	Teresa Galeano Díaz						
Área de conocimiento	Química Analítica						

*(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:

Vº Bº y Firma del Director del Dpto

A handwritten signature in blue ink, appearing to be 'T. Gu' with a long horizontal stroke extending to the right.

Vº Bº y Firma del Tutor/es

Two handwritten signatures in blue ink. The first is 'T. Gu' with a long horizontal stroke, and the second is a more complex signature, possibly 'A. ...'.

Decanato de la Facultad de Ciencias