



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: 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: 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: 23/10/2015



Vº Bº y Firma del Director del Dpto

A handwritten signature in black ink, appearing to read "Jorge Sansón", is written over a large, stylized circular scribble.

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:

“Elaboración de una guía con experiencias llevadas a cabo con ordenador adaptadas a los contenidos curriculares de Química de en Educación Secundaria”.

- CARACTERÍSTICAS DEL TRABAJO FIN DE GRADO

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

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

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

*** Objetivos Generales:**

- Familiarizarse con las enseñanzas de química en los niveles preuniversitarios
- Desarrollar metodologías que faciliten el aprendizaje de la materia mediante el uso de software y elaboración de manuales y guías prácticas
- Conocimiento de los contenidos curriculares de Química en la Enseñanza Secundaria
- Búsqueda de software adecuado para la consolidación de los conceptos de la Química de Secundaria
- Utilización del software seleccionado.

*** Objetivos Específicos:**

- Selección de software asequible para complementar e ilustrar los conceptos químicos adaptados a los contenidos curriculares de la materia
- Utilización del software seleccionado
- Elaboración de un manual guía de uso del software seleccionado
- Elaboración de fichas sencillas adaptadas a los conceptos reforzados con el software

*** Metodología de Trabajo:**

- Revisión del contenido curricular de Química en Educación Secundaria
- Búsqueda de programas y vídeos relacionados con los contenidos seleccionados en el apartado anterior
- Utilización del software seleccionado
- Elaboración de manuales y guías.

*** Bibliografía**

- Textos de Física y Química de Secundaria
- R. Chang; "Química", 10ª Ed., McGraw-Hill (2010)
- R. H. Petrucci, W.S. Harwood, F. G. Herring; "Química General", 8ª Ed., Prentice Hall (2003)
- Internet

Observaciones:

-TUTORES:

Nombre: **Dr. Evaristo A. OJALVO SÁNCHEZ** (evaristo@unex.es)

Área de conocimiento: **Química Física**

Fecha de aprobación del Consejo del Departamento: 23/10/2015



Vº Bº y Firma del Director del Dpto.

A handwritten signature in black ink, consisting of several loops and a long horizontal stroke at the end.

Vº Bº y Firma del Tutor

ANEXO 1 PROPUESTA DE TRABAJO FIN DE GRADO

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

-TÍTULO DEL TRABAJO: Estudio comparativo de las propiedades de líquidos de distinta polaridad empleando técnicas de simulación de dinámica molecular

- 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...)

Estudiar las propiedades y estructura de líquidos mediante la realización de simulaciones de dinámica molecular. Se trataría de calcular propiedades termodinámicas (tanto estáticas como dinámicas) y estructurales de líquidos puros y/o disoluciones. Se realizará un estudio comparativo de líquidos de distinta polaridad, intentando relacionar sus propiedades con parámetros tanto macroscópicos (densidad, constante dieléctrica, etc) como microscópicos (polarizabilidades, momentos dipolares, etc).

Titulación: Grado en Química

Observaciones:

-TUTORES:

Nombre: Manuel Ángel Aguilar Espinosa, M. Elena María Navarro

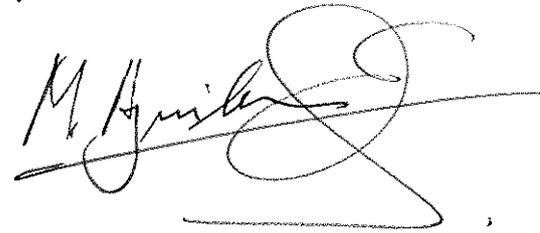
Área de conocimiento: Química Física

Fecha de aprobación del Consejo del Departamento: 23/10/2015



A handwritten signature is written over a circular stamp. The stamp contains the text: "DPTO. INGENIERIA QUÍMICA Y QUÍMICA FÍSICA" around the top edge, "UNIVERSIDAD DE EXTREMADURA" in the center, and "DPTO. INGENIERIA QUÍMICA Y QUÍMICA FÍSICA" around the bottom edge.

Vº Bº y Firma del Director del Dpto



A handwritten signature, likely of the tutor, written in black ink.

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.

Efectuar el tratamiento matemático de datos procedentes de procesos químicos y gestión de calidad de los laboratorios.

Evaluación, interpretación y síntesis de datos e información química. Obtención, procesamiento y tratamiento, mediante técnicas computacionales, de datos químicos.

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.

Capacidad para aprender nuevas técnicas y conocimientos que permitan emprender estudios posteriores con un alto grado de autonomía.

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: 23/10/2015



A handwritten signature is written over a circular stamp. The stamp contains the text: "DPTO. INGENIERIA QUÍMICA Y QUÍMICA FÍSICA" around the top edge and "UNIVERSIDAD DE EXTREMADURA" in the center.

Vº Bº y Firma del Director del Dpto



A handwritten signature is written on a line.

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: 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

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: 23/10/2015



Vº Bº y Firma del Director del Dpto

A handwritten signature in black ink, appearing to be "M. Aguilar".

Vº Bº y Firma del Tutor

Decanato de la Facultad de Ciencias

ANEXO 1 PROPUESTA DE TRABAJO FIN DE GRADO EN QUÍMICA

-DEPARTAMENTO DE LA UEX RESPONSABLE DE LA OFERTA: Departamento de Química Analítica

-TÍTULO DEL TRABAJO: Estudio del comportamiento voltamperométrico del indio sobre electrodos impresos. Aplicabilidad analítica.

- 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		Experimental	X	Otros (especificar)	

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

El objetivo del trabajo es estudiar el comportamiento voltamperométrico del indio sobre diferentes tipos de electrodos impresos (bismuto, oro, carbono modificado). Se trata de un elemento poco estudiado desde el punto de vista electroanalítico, cuyo interés ambiental ha aumentado recientemente por su empleo creciente en la fabricación de materiales tecnológicos avanzados para la industria electrónica, fotovoltaica o de iluminación (LED).

El desarrollo del trabajo consistirá en una revisión bibliográfica de los métodos electroanalíticos publicados para la determinación de indio, que en su gran mayoría están basados en el empleo del electrodo de mercurio. Seguidamente, se explorará experimentalmente el comportamiento voltamperométrico del analito sobre diferentes tipos de electrodos impresos, investigando el efecto de las diversas variables experimentales implicadas en la medida. Finalmente, se establecerán los parámetros de calibración y se explorarán algunas posibilidades analíticas en

muestras reales de materiales, así como en muestras ambientales de aguas, suelos o aerosoles atmosféricos

Titulación: Grado en Química

Observaciones: Se recomienda que el estudiante haya superado las asignaturas "Análisis Instrumental" y "Química Analítica Avanzada"

-TUTORES:

Nombre: Eduardo C. Pinilla Gil

Área de conocimiento: Química Analítica

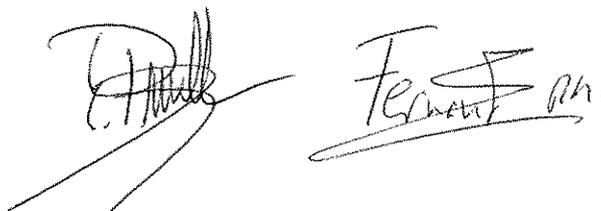
Nombre: Fernando Rueda Holgado

Área de conocimiento: Química Analítica

Fecha de aprobación del Consejo del Departamento: 23 octubre 2015



Vº Bº y Firma del Director del Dpto



Vº Bº y Firma del Tutor



UNIVERSIDAD DE EXTREMADURA

FACULTAD DE CIENCIAS

ANEXO 1 PROPUESTA DE TRABAJO FIN DE GRADO EN QUÍMICA

-DEPARTAMENTO DE LA UEX RESPONSABLE DE LA OFERTA: Química Analítica

-TÍTULO DEL TRABAJO: Desarrollo de una nueva metodología analítica para la extracción asistida por ultrasonidos de metales pesados en muestras de ambientales.

- 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		Experimental	x	Otros (especificar)	

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

El objetivo del trabajo es desarrollar y validar una nueva metodología analítica para la extracción asistida por ultrasonidos de metales pesados en muestras ambientales aplicando para ello un diseño de experimento previo a una etapa de detección ICP-MS.

Metodología:

- Revisión bibliográfica
- Optimización de las variables de la etapa de extracción ultrasónica con materiales de referencia certificados empleando un diseño de experimento.

- Aplicación del método a muestras reales de suelos contaminados.
- Discusión de los resultados.
- Redacción del trabajo.

Titulación: Grado en Química

Observaciones:

-TUTORES:

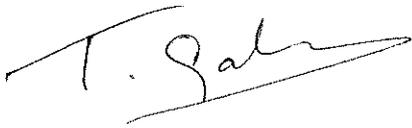
Nombre: Lorenzo Calvo Blázquez

Nombre: María Rosario Palomo Marín

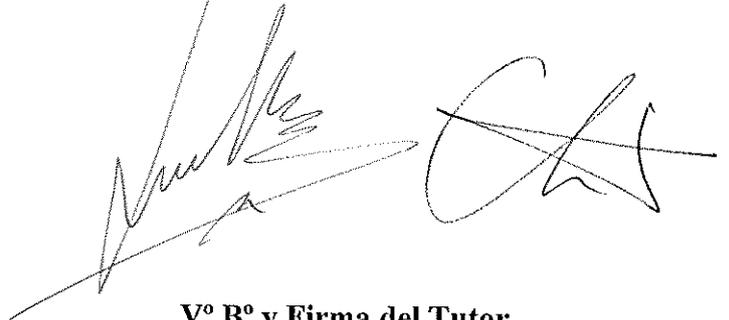
Área de conocimiento: Química Analítica

Área de conocimiento: Química Analítica

Fecha de aprobación del Consejo del Departamento: 23 octubre - 2015



Vº Bº y Firma del Director del Dpto



Vº Bº y Firma del Tutor

Decanato de la Facultad de Ciencias



UNIVERSIDAD DE EXTREMADURA

FACULTAD DE CIENCIAS

GRADO EN QUÍMICA

ANEXO 1
PROPUESTA DE TRABAJO FIN DE GRADO

-DEPARTAMENTO DE LA UEX RESPONSABLE DE LA OFERTA: QUÍMICA ANALÍTICA

-TÍTULO DEL TRABAJO: *Comportamiento electroanalítico del furfural y del 5-hidroximetilfurfural. Aplicación a su determinación en alimentos.*

- 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	Experimental	X Otros (especificar)	

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

El furfural (FUR) y el 5-hidroximetilfurfural (HMF) están presente en muchos productos alimenticios como productos de degradación de los azúcares. Su presencia puede ser una indicación del deterioro y/o adulteración debido al estrés calórico de los azúcares que contienen determinados alimentos o zumos y como consecuencia, la aparición del HMF y/o FUR.

Hay que tener en cuenta que las condiciones de almacenamiento de los alimentos puede influir, tal como la temperatura, la exposición a la luz solar, etc.

Por tanto, la presencia de HMF como de FUR se relaciona con la frescura y por consiguiente con la calidad de estos productos alimenticios, por ello, su control es de importancia tanto desde el punto de vista de la calidad de los mismos como los posibles efectos de su presencia en la salud, aunque no está evidenciado completamente el efecto adverso.

Los objetivos que se plantean son los siguiente:

-Manejo de fuentes bibliográficas y búsquedas de antecedentes bibliográficos de los analitos seleccionados para desarrollar métodos para la determinación de ambos compuestos mediante

métodos electroanalíticos y técnicas quimiométricas.

La metodología a seguir se esquematiza en los siguientes puntos:

- Revisión bibliográfica.
- Estudio electroanalítico del HMF y del FUR utilizando diferentes tipos de electrodos entre los que se encuentran los electrodos impresos de film de mercurio: Estudios básicos tales como influencia del pH, estudio de variables instrumentales en electrodos sólidos y electrodos impresos modificados o no.
- Desarrollo de un método electroanalítico para la determinación conjunta de HMF y FUR mediante métodos quimiométricos.
- Iniciación al desarrollo de un método electroanalítico mediante FIA.

Observaciones: Dirigirán el TFG los doctores por la UEx: Agustina Guiberteau Cabanillas, Isabel Durán Martín Merás del departamento de Química Analítica de la UEx, y la doctoranda Carmen Belén Godoy Cancho.

-TUTORES:

Nombre: AGUSTINA GUIBERTEAU CABANILLAS

Área de conocimiento: Química Analítica. Facultad de Ciencias. Universidad de Extremadura

Nombre: ISABEL DURÁN MARTÍN MERÁS

Área de conocimiento: Química Analítica. Facultad de Ciencias. Universidad de Extremadura

Nombre: CARMEN BELÉN GODOY CANCHO

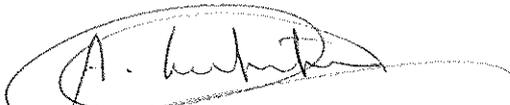
Área de conocimiento: Química Analítica. Facultad de Ciencias. Universidad de Extremadura

Fecha de aprobación del Consejo del Departamento: 23 octubre - 2015

Vº Bº y Firma del Tutor

Vº Bº y Firma del Tutor

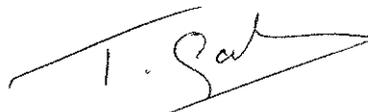
Vº Bº y Firma del Tutor


Agustina Guiberteau


Isabel Durán Martín Merás


BELÉN GODOY CANCHO

Vº Bº y Firma del Director del Dpto Química Analítica


Teresa Galeano Bráiz

Ilma Sra. Decana de la Facultad de Ciencias



UNIVERSIDAD DE EXTREMADURA

FACULTAD DE CIENCIAS

GRADO EN QUÍMICA

ANEXO 1 PROPUESTA DE TRABAJO FIN DE GRADO

-DEPARTAMENTO DE LA UEX RESPONSABLE DE LA OFERTA: QUÍMICA ANALÍTICA

-TÍTULO DEL TRABAJO: *Estudio electroanalítico de antioxidantes en Biodiesel, propuesta de métodos de análisis.*

- 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	Experimental	X Otros (especificar)	

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

Se denomina BIODIESEL al combustible renovable compuesto por ésteres metílicos o etílicos de ácidos grasos que se obtiene a partir de aceites vegetales y/o grasas animales. Lo más habitual es que los ésteres que componen el biodiesel sean metílicos y entonces se denomina FAME (Fatty acid methyl ester). La composición y propiedades están definidas en la norma EN 14214.

El Biodiésel aparece regulado en el Real Decreto 61/2006, de 31 de enero, por el que se determinan las especificaciones de gasolinas, gasóleos, fuelóleos y gases licuados del petróleo y se regula el uso de determinados biocarburantes.

Entre las características más destacables son, entre otras, que es renovable y biodegradable, menos

contaminante ya que no contiene azufre ni aromáticos polinucleares. Las emisiones gaseosas que se producen en su combustión contienen menos cantidad de combustible no quemado, monóxido de carbono y aldehídos. El biodiesel se plantea como alternativa a los combustibles fósiles.

Por otra parte, es posible incrementar la estabilidad natural del biodiesel adicionando compuestos antioxidantes. Existen antecedentes bibliográficos relacionados con la eficiencia de diferentes antioxidantes sintéticos sobre la estabilidad oxidativa del biodiesel comercial. Otros trabajos se centran en la extracción previa en los aceites de los antioxidantes naturales presentes, así como los hidroperóxidos. El aceite purificado se transesterifica para obtener los esteres metílicos purificados, estudiando posteriormente el efecto sobre la estabilidad de los esteres metílicos purificados al adicionarles antioxidantes fenólicos.

El objeto del trabajo va encaminado al estudio del comportamiento electroanalítico de esos compuestos antioxidantes adicionados en biodiesel al objeto de desarrollar métodos para su análisis y determinación en la citada matriz, utilizando Análisis de Inyección de Flujo (FIA) con electrodos impresos modificados con grafeno. Se pretende definir un índice total de antioxidantes fenólicos presentes en la muestra expresados como equivalente en el antioxidante seleccionado al efecto.

Los objetivos que nos planteamos son los siguientes:

- Manejo de fuentes bibliográficas y búsqueda de antecedentes de los analitos de interés y de la matriz donde se determinarán.
- Legislación.
- Utilización de metodologías de optimización, caracterización y análisis de los analitos de interés.
- Desarrollo y puesta a punto del método propuesto para su aplicación "in situ", de los analitos seleccionados.

En cuanto la metodología de trabajo a seguir se esquematiza en los siguientes puntos:

- Revisión bibliográfica.
- Desarrollo y puesta a punto de métodos analíticos para el análisis de compuestos antioxidantes fenólicos utilizando electrodos impresos.

Respecto a la temporalización que se propone es la siguiente:

- Primera etapa: Revisión bibliográfica.
- Estudio electroanalítico de compuestos de interés utilizando electrodos impresos en las matrices de biodiesel.
- Análisis de resultados.
- Redacción y elaboración de conclusiones.

Observaciones:

El trabajo fin de grado lo dirigirá la Dra. Agustina Guiberteau Cabanillas, del departamento de Química Analítica, el Dr. Manuel Martínez Cañas, del CICYTEX de la Junta de Extremadura y la doctoranda Dña. Belén Godoy Cancho, del departamento de Química Analítica.

-TUTORES:

Nombre: AGUSTINA GUIBERTEAU CABANILLAS

Área de conocimiento: Química Analítica

Nombre: MANUEL MARTINEZ CAÑAS

Institución: CICYTEX. JUNTA DE EXTREMADURA

Nombre: BELÉN GODOY CANCHO

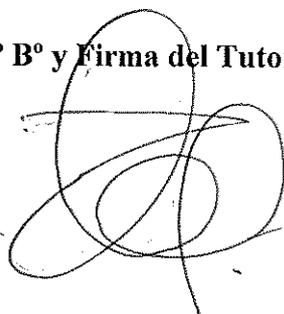
Área de conocimiento: Química Analítica

Fecha de aprobación del Consejo del Departamento: 23 octubre - 2015

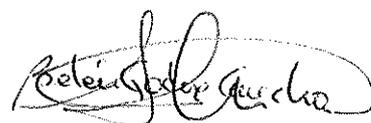
Vº Bº y Firma del Tutor


Agustina Guiberteau
Cabanillas

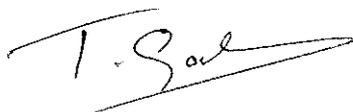
Vº Bº y Firma del Tutor



Vº Bº y Firma del Tutor

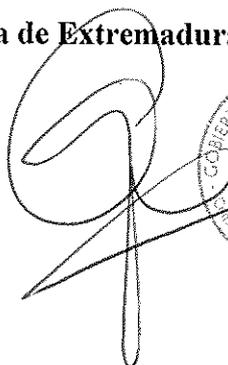


Vº Bº y Firma del Director del Dpto. de Química Analítica



Vº Bº y Firma del Director/a General de CICYTEX

Junta de Extremadura




Ilma. Sra. Decana 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:
Departamento de Química Orgánica e Inorgánica

-TÍTULO DEL TRABAJO:

Síntesis de heterociclos mediante nuevas reacciones de Ugi

- 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		Experimental	X	Otros (especificar)	

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

Los isonitrilos son compuestos excepcionales que poseen una reactividad singular. Son los únicos compuestos orgánicos estables que contienen un carbono divalente, que en sus reacciones se oxida a carbono tetravalente. Así, el grupo isocianuro da lugar típicamente a procesos de α -adición, en los que pueden formarse enlaces diversos con altas quimio-, regio- y estereoselectividades, incluso en presencia de una gran variedad de grupos funcionales. Estas características hacen que los isonitrilos sean fundamentalmente diferentes a otros grupos funcionales y que sus reacciones sean idóneas para la preparación de moléculas polifuncionales complejas, con posible actividad biológica.

El objetivo de este proyecto es investigar nuevas reacciones de isonitrilos basadas en la reacción clásica de Ugi de cuatro componentes para la preparación de estructuras heterocíclicas inéditas y potencialmente útiles en la obtención de fármacos.

La ejecución de este proyecto permitirá el descubrimiento de metodologías sintéticas originales

y altamente eficaces para la síntesis enfocada de pequeñas colecciones de compuestos potencialmente bioactivos.

Observaciones: Grado en Química. El trabajo experimental se realizará en el Departamento de Química Orgánica e Inorgánica en Cáceres.

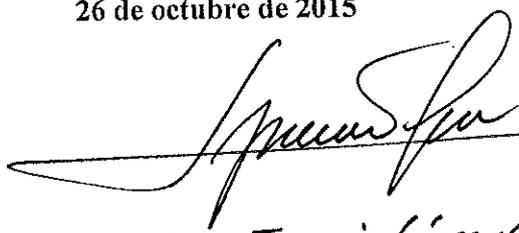
-TUTORES:

Nombre: Ana M. Gómez Neo, Jesús Díaz Álvarez y Carlos Fernández Marcos

Área de conocimiento: Química Orgánica

Fecha de aprobación del Consejo del Departamento:

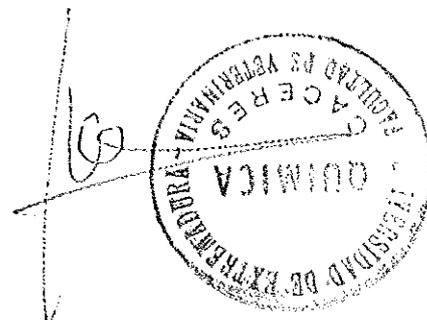
26 de octubre de 2015



Vº Bº y Firma del Director del Dpto



Vº Bº y Firma del Tutor



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:
Química Orgánica e Inorgánica

-TÍTULO DEL TRABAJO:

Preparación de carbón activado a partir de un material lignocelulósico modificado químicamente

- CARACTERÍSTICAS DEL TRABAJO FIN DE GRADO

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

Teórico	<input type="checkbox"/>	Revisión e investigación bibliográfica	<input type="checkbox"/>	Numérico	<input type="checkbox"/>
Proyectos de ingeniería	<input type="checkbox"/>	Proyectos de diseño industrial	<input type="checkbox"/>	Informes	<input type="checkbox"/>
Computacional	<input type="checkbox"/>	Experimental X	<input checked="" type="checkbox"/>	Otros (especificar)	<input type="checkbox"/>

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

La madera es la materia prima más abundante disponible en el Planeta Tierra, la cual no está siendo aprovechada de forma suficiente debido sobre todo a su composición química, que es muy compleja. Los tres biopolímeros más abundantes constituyentes de las maderas son las hemicelulosas, celulosa y lignina. Una aplicación de la madera es como material de partida en la preparación de carbón activado ya que, por la abundancia de la madera, permite obtener un material a unos costes de producción más bajos que si se prepara de otras materias primas diferentes. El carbón activado suele prepararse por los conocidos métodos de activación física y activación química, los cuales constan de dos etapas de carbonización y activación y de impregnación y carbonización, respectivamente. En relación con el segundo de estos métodos suele aceptarse que el agente activante interacciona químicamente con el sustrato lignocelulósico

durante la etapa de impregnación. Pues bien, el presente proyecto fin de grado para alumnos de Química tiene como objetivo investigar la posible influencia de la composición biopolimérica del material de partida sobre las propiedades de los carbones preparados por el citado método de activación química. Para ello se procederá a la eliminación parcial de componentes poliméricos de dicho material por tratamiento químico antes de llevar a cabo la preparación del carbón por el método habitual. El tratamiento químico se efectuará con agentes químicos tales como ácidos y/o oxidantes y el carbón activado se preparará empleando ácido fosfórico como agente activante y calentando a 450 °C en la etapa de carbonización. Los productos obtenidos serán analizados mediante análisis elemental y por adsorción de N₂ a 77 K, porosimetría de mercurio, espectroscopia infrarroja, etc.

Titulación: Grado de Química

Observaciones: Ninguna

-TUTORES:

Nombre:

Vicente Gómez Serrano

Carmen Fernández González

María Alexandre Franco

Área de conocimiento: Química Inorgánica

Fecha de aprobación del Consejo del Departamento: 26-octubre-2015


Ignacio López-Coca Martín

Vº Bº y Firma del Director del Dpto






Vº Bº y Firma del Tutor

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:
Química Orgánica e Inorgánica

-TÍTULO DEL TRABAJO:

Formación de grupos funcionales de oxígeno en carbón activado

- 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		Experimental X	Otros (especificar)	

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

El carbón activado es un material poroso de carbón ampliamente utilizado como adsorbente, catalizador y soporte de catalizadores debido a su estructura porosa y a los grupos funcionales superficiales. Estas propiedades físico-químicas del carbón dependen del material de partida y del método de preparación. A veces, sin embargo, cuando se utiliza el carbón con fines específicos y para aumentar su eficiencia, puede requerirse que el material posea unas características texturales y químico-superficiales determinadas, siendo necesario entonces proceder a la modificación de las mismas. En el presente trabajo fin de grado para los alumnos de Química, partiendo de varios carbones activados con una composición química superficial y carácter ácido-base diferentes, como principal objetivo se pretende modificar dicha composición de forma controlada mediante tratamiento químico de oxidación tanto por vía húmeda como por vía seca a bajas temperaturas. Los productos obtenidos serán estudiando mediante análisis elemental y térmico y por

espectroscopia infrarroja y medida del pH del punto de carga cero.

Titulación: Grado de Química

Observaciones: Ninguna

-TUTORES:

Nombre:

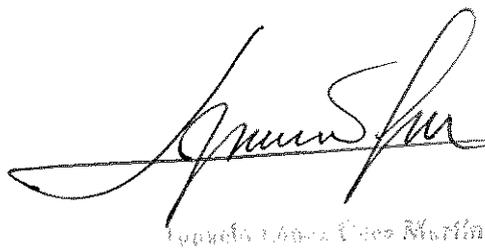
Vicente Gómez Serrano

Carmen Fernández González

María Alexandre Franco

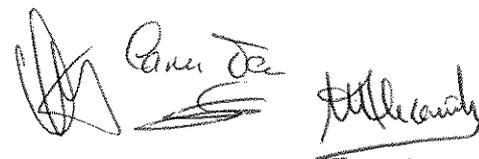
Área de conocimiento: Química Inorgánica

Fecha de aprobación del Consejo del Departamento: 26-octubre-2015



Vicente Gómez Serrano

Vº Bº y Firma del Director del Dpto



Carmen Fernández González
María Alexandre Franco

Vº Bº y Firma del Tutor

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: Química Orgánica e Inorgánica

-TÍTULO DEL TRABAJO: Eliminación de contaminantes inorgánicos mediante tratamiento con nanopartículas de hierro cerovalente (nZVI).

- 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		Experimental		Otros (especificar)	

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

Las nanopartículas de hierro de valencia cero (nZVI) han captado la atención de la comunidad científica en los últimos años debido a su capacidad de degradar rápidamente muchos contaminantes ambientales dando lugar a subproductos benignos con el medio ambiente. Por ello, se las considera como un prometedor agente de remediación de la contaminación "*in situ*". Debido a su pequeño tamaño, que lleva aparejado un aumento de la reactividad, estas nanopartículas son más eficaces en la degradación de contaminantes que otros métodos empleados tradicionalmente.

Este Trabajo de Fin de Grado pretende llevar a cabo una revisión del estado actual del tema a través de los trabajos de investigación publicados en relación con la preparación, caracterización y uso de las nanopartículas de hierro cerovalente en procesos de eliminación de contaminantes

inorgánicos presentes en aguas.

Con el desarrollo de este trabajo se trata de introducir al alumno en el proceso de revisión bibliográfica que necesariamente ha de preceder el inicio de cualquier trabajo de investigación. Se pone a disposición del alumnado todas las herramientas de búsqueda disponibles en la Universidad de Extremadura, con especial mención de las bases de datos Scopus y Sciencedirect.

Titulación: Grado en Química

Observaciones: Se recomienda haber cursado y superado las asignaturas Química Inorgánica General, Ampliación de Química Inorgánica I y Ampliación de Química Inorgánica II.

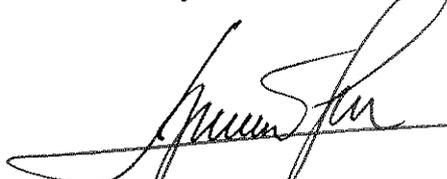
-TUTORES:

Nombre: Eduardo Manuel Cuerda Correa, Carmen Fernández González y María F. Alexandre Franco.

Área de conocimiento: Química Inorgánica

Fecha de aprobación del Consejo del Departamento: 26 de octubre de 2015.

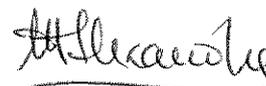
Vº Bº y Firma del Director del Depto


Ignacio López-Coca Martín



Vº Bº y Firma del Tutor


C. Fernández


M.F. Alexandre

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: Química Orgánica e Inorgánica

-TÍTULO DEL TRABAJO: Impregnación de carbón activado con nanopartículas de hierro cerivalente (nZVI). Influencia de variables y optimización del proceso.

- 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		Experimental	X	Otros (especificar)	

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

Las nanopartículas de hierro de valencia cero (nZVI) han captado la atención de la comunidad científica en los últimos años debido a su capacidad de degradar rápidamente muchos contaminantes ambientales dando lugar a subproductos benignos con el medio ambiente. Por ello, se las considera como un prometedor agente de remediación de la contaminación "in situ". Debido a su pequeño tamaño, que lleva aparejado un aumento de la reactividad, estas nanopartículas son más eficaces en la degradación de contaminantes que otros métodos empleados tradicionalmente.

Por su parte, el carbón activado es un material de carbono que presenta un elevado grado de desarrollo de su superficie específica y porosidad, lo que permite emplearlo en diversos procesos de importancia industrial y medioambiental, fundamentalmente aquellos relacionados con la adsorción y la catálisis.

La dispersión de estas nanopartículas en la superficie del carbón activado permite aunar las excelentes propiedades de ambos materiales con miras, por ejemplo, a la eliminación de contaminantes en disolución acuosa.

Este Trabajo de Fin de Grado pretende optimizar el proceso de impregnación de un carbón activado comercial con nZVI, mediante el empleo del diseño estadístico de experimentos así como llevar a cabo la caracterización de las muestras que se consideren de mayor interés. En la medida de lo posible, se tratará de ensayar también la capacidad de

uso de los materiales preparados en procesos de eliminación de contaminantes presentes en aguas.

Entre los objetivos formativos del proyecto se encuentran los siguientes:

- 1) Familiarizar al alumno con las técnicas y metodologías habituales de trabajo en el laboratorio así como con el análisis y discusión de datos experimentales.
- 2) Introducir al alumno en el uso del diseño estadístico de experimentos como herramienta para averiguar si unos determinados factores influyen en la variable de interés y, si existe influencia de algún factor, cuantificarla.
- 3) Preparar y caracterizar carbones activados impregnados con nZVI con vista a sus potenciales usos en eliminación de contaminantes en disolución acuosa.

Como se acaba de indicar, para la ejecución del trabajo se seguirá un método basado en el diseño estadístico de experimentos, de modo que se procederá a optimizar una o más variables objetivo mediante el empleo de la metodología de superficie de respuesta (conocida por sus siglas en inglés, RSM).

Titulación: Grado en Química

Observaciones: Se recomienda haber cursado y superado las asignaturas Química Inorgánica General, Ampliación de Química Inorgánica I y Ampliación de Química Inorgánica II.

-TUTORES:

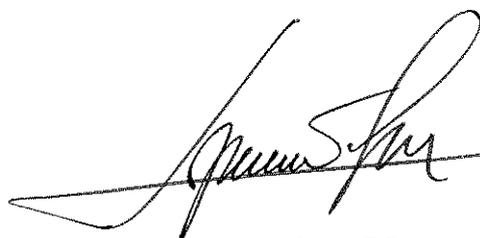
Nombre: Eduardo Manuel Cuerda Correa, Carmen Fernández González y María F. Alexandre Franco.

Área de conocimiento: Química Inorgánica

Fecha de aprobación del Consejo del Departamento: 26 de octubre de 2015.

Vº Bº y Firma del Director del Dpto

Vº Bº y Firma del Tutor



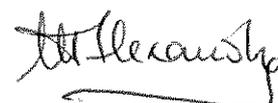
Ignacio López-Coca Martín



E.M. Cuerda



C. Fernández



M.F. Alexandre

Decanato de la Facultad de Ciencias

ANEXO 1 PROPUESTA DE TRABAJO FIN DE GRADO

- DPTO. DE LA UEX RESPONSABLE DE LA OFERTA:** Expresión Gráfica
- TÍTULO DEL TRABAJO:** Estudio bibliográfico sobre el modelado de un sensor REDOX en un proceso biológico de depuración de aguas residuales según los modelos matemáticos de comportamiento biológico de los grupos de trabajo del IWA.
- **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		Experimental		Otros (especificar)	

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

El trabajo es bibliográfico y de investigación pura, donde el resultado es muy incierto, ya que lo que se pretende hacer es bastante complicado.

Se trata de lograr predecir el valor que tendría un hipotético sensor REDOX que se introdujera en el tanque biológico de una EDAR, sólo que el comportamiento de dicha EDAR es modelado matemáticamente, por lo que todos los valores son accesibles, pero la relación con el REDOX es complicada y no investigada hasta la fecha.

Por tanto, se necesita a un candidato que tenga especial vocación por este tipo de problemas, que tenga bastantes conocimientos de electroquímica y con suficientes conocimientos de matemáticas como para comprender un sistema de ecuaciones en derivadas parciales, además de todos los parámetros que definen la contaminación de un agua residual, así como los mecanismos biológicos tanto aerobios como anóxicos que se producen en este tipo de proceso.

Para la realización de las simulaciones se utilizará el programa MATLAB, por lo que el alumno debería estar familiarizado con su programación y elaboración de GUIs para interacción con la simulación que se realice.

Titulación: Químicos

Observaciones: no hay más observaciones.

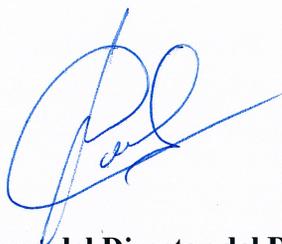
-TUTORES:

Nombre: Enrique Martínez de Salazar Martínez

Área de conocimiento: Proyectos

Fecha de aprobación del Consejo del Departamento:

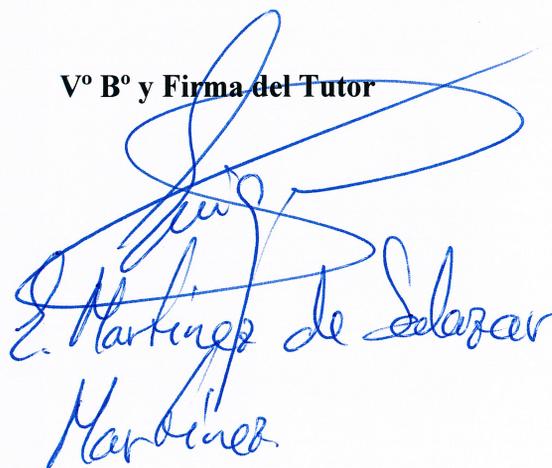
28/10/2015



Vº Bº y Firma del Director del Dpto



Vº Bº y Firma del Tutor



E. Martínez de Salazar
Martínez

Decreto de la Facultad de Ciencias

**ANEXO 1
PROPUESTA DE TRABAJO FIN DE GRADO**

-DEPARTAMENTO DE LA UEX RESPONSABLE DE LA OFERTA: Expresión Gráfica

-TÍTULO DEL TRABAJO: Revisión de la normativa aplicable al Dibujo Técnico.

- 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		Experimental		Otros (especificar)	

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

En el Dibujo Técnico se tienen unas situaciones repetitivas en las cuales se debe actuar de acuerdo a las normas correspondientes. Debido a que dichas normas son dinámicas en el tiempo, en ocasiones las soluciones que se plantean están desfasadas por plantearse en función de directrices que ya no aparecen en la normativa. Por ello, se propone realizar una revisión y actualización de las normas principales que deberán tenerse presente a la hora de efectuar cualquier dibujo en el ámbito de la ingeniería.

Titulación: Grado Ingeniería Química o Grado Química

Observaciones:

-TUTORES:

Nombre: Francisco Jesús Moral García

Área de conocimiento: Expresión Gráfica en la Ingeniería

Fecha de aprobación del Consejo del Departamento:

28/10/2015



Vº Bº y Firma del Director del Dpto



Vº Bº y Firma del Tutor



Decanato de la Facultad de Ciencias