

**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 de viabilidad de procesos de concentración de zumos/mostos

- CARACTERÍSTICAS DEL TRABAJO FIN DE GRADO

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

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

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

El alumno deberá conocer y ampliar operaciones de separación avanzadas y aplicadas en las industrias actualmente establecidas por la zona con el objetivo de mejorar y/o sustituir dichos procesos por otros cuyo rendimiento compense la inversión a realizar. Para ello tras una exhaustiva búsqueda bibliográfica procederá a evaluar alternativas y comprar con las existentes. Analizando la disponibilidad, complejidad, riesgos y coste de cada proceso que se plantee como alternativa. Para simular el proceso se realizara el correspondiente modelo y sobre el mismo se analizaran las diferentes variables de diseño implicadas. Evaluando finalmente los costes de proceso y el intervalo óptimo de funcionamiento.

Titulación: GRADO EN INGENIERÍA QUÍMICA INDUSTRIAL, QUÍMICA y ~~ENOLOGÍA~~

Observaciones: Absténgase alumnos con asignaturas de 1º y 2º pendiente

-TUTOR:

Nombre: BENITO ACEDO HIDALGO

Área de conocimiento: INGENIERÍA QUÍMICA

Fecha de aprobación del Consejo del Departamento: 24/10/2014

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: 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

Área de conocimiento: Química Física

Fecha de aprobación del Consejo del Departamento: 24/10/2014

A handwritten signature in black ink is written over a circular stamp. The stamp contains the text "DEPARTAMENTO DE QUÍMICA FÍSICA" and "FACULTAD DE CIENCIAS" around the perimeter.

Vº Bº y Firma del Director del Dpto

A handwritten signature in black ink, appearing to read "M. Aguilar", is written over a horizontal 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: 24/10/2014


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:
“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	<input checked="" type="checkbox"/>	Númérico	
Proyectos de ingeniería		Proyectos de diseño industrial		Informes	
Computacional	<input checked="" type="checkbox"/>	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:

GRADO en QUÍMICA

- TUTORES:

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

Área de conocimiento: **Química Física**

Fecha de aprobación del Consejo del Departamento:

24/10/2014



Vº Bº y Firma del Director del Dpto.



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. Área Química Física

-TÍTULO DEL TRABAJO:

Viscosimetría de disoluciones de polímeros de cadena lineal en "buenos disolventes".

- 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	X	Otros (especificar)	

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

OBJETIVOS

1. 1.- Familiarizar al alumno con el campo de los polímeros y la determinación de magnitudes de transporte en disolución (competencias C1, C4, C6, C12, C15-C21).
2. 2.- Incidir en las diferencias de comportamiento, en disolución, entre moléculas y macromoléculas (competencias C9, C14, C25, C26, C27).
3. 3.- Potenciar las capacidades y recursos del alumno en lo que respecta a la planificación y desarrollo de experiencias, toma de decisiones, búsqueda y gestión de información y comunicación de resultados (competencias C23, C24, C28-C32, C35).

METODOLOGÍA

Se trata de un trabajo de carácter experimental, a desarrollar en los laboratorios del Área de Química Física. Consiste en la planificación, desarrollo y adaptación de actividades prácticas elementales (aprendidas durante el Grado) al campo de los polímeros en disolución. Con el equipamiento adecuado, se determina la viscosidad de disoluciones de un polímero en condiciones de "buenos disolventes" al objeto de proporcionar valores de la viscosidad intrínseca, analizar la concordancia con leyes propuestas y realizar un estudio comparativo sobre la calidad de los disolventes. Los resultados se contrastan con los obtenidos mediante cálculos teóricos y con los recogidos en la bibliografía especializada.

Titulación: GRADO EN QUÍMICA

Observaciones:

-TUTORES:

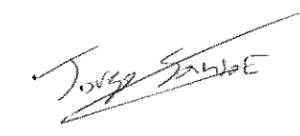
Nombres: JORGE A. SANSÓN MARTÍN Y M^a MERCEDES TIRADO GARCÍA

Área de conocimiento: QUÍMICA FÍSICA

Fecha de aprobación del Consejo del Departamento: 24/10/2014



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. Área Química Física

-TÍTULO DEL TRABAJO:

Medida de propiedades físicas de líquidos puros y mezclas binarias. Adaptación de tareas básicas de laboratorio para alumnos con movilidad reducida.

- 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	X
Computacional		Experimental	X	Otros (especificar)	

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

OBJETIVOS

1. Estudiar la variación, con la concentración, de las propiedades físicas de mezclas líquidas binarias
2. Potenciar las capacidades y recursos del alumno en la planificación y desarrollo de dichas experiencias, toma de decisiones y adaptarlas a la discapacidad, considerando la actual legislación vigente
3. Elaborar un protocolo de actuación para facilitar la realización de experiencias de laboratorio por parte de alumnos con movilidad reducida
4. Mostrar las diferencias en la consecución de objetivos académicos entre personas sin y con discapacidad

METODOLOGÍA

Para la realización de este trabajo el alumno deberá ponerse en el lugar de una persona con movilidad reducida y realizar el trabajo de laboratorio propuesto. Para ello deberá planificar y poner en práctica, en función de la discapacidad de que se trate, los diferentes procedimientos a seguir: acceso a las instalaciones, manipulación de reactivos, manejo de instrumentación y realización de la experiencia citada. El trabajo de laboratorio consiste en la determinación de propiedades físicas (viscosidad, densidad, índice de refracción y tensión superficial) para líquidos puros y mezclas binarias. Se estudiará la variación de las propiedades con la composición. Asimismo, se constatarán las dificultades, las tareas para las que precisa ayuda y las que resulten imposibles de realizar a causa de la discapacidad, y se propondrán protocolos de actuación adaptados a la misma.

Titulación: GRADO EN QUÍMICA

Observaciones:

-TUTORES:

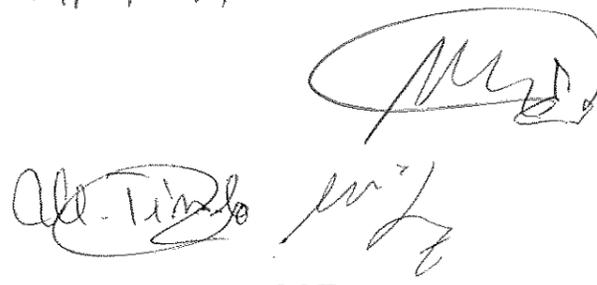
Nombres: MARÍA LLORCA GARCÍA¹, MARÍA LUZ SÁNCHEZ MENDOZA² Y M^a MERCEDES TIRADO GARCÍA²

Área de conocimiento: ¹UNIDAD DE ATENCIÓN AL ESTUDIANTE y ²QUÍMICA FÍSICA

Fecha de aprobación del Consejo del Departamento: 24/10/2014



Vº Bº y Firma del Director del Dpto



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: *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.

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 aun 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: 24/10/2014

V° B° y Firma del Director del Dpto



V° B° 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:

Química Orgánica e Inorgánica

-TÍTULO DEL TRABAJO:

Investigación de metodologías de transformación en procesos ene mediante catalizadores en medios neotéricos.

-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 mejorar desde el punto de vista de la eficiencia y la sostenibilidad las metodologías de transformación en procesos ene de moléculas orgánicas y su aplicación a monoterpenoides naturales. Se aplicarán catalizadores y medios de reacción neotéricos.

- Se realizará una revisión bibliográfica para conocer el estado del arte.
- Se definirán y prepararán sistemas catalíticos asociados a diferentes medios reaccionales.
- Se investigará el efecto de los diferentes sistemas en la eficiencia de la transformación.
- Se extraerán conclusiones y se aplicará las mejores condiciones a monoterpenoides naturales de interés industrial.

Titulación: Grado en Química

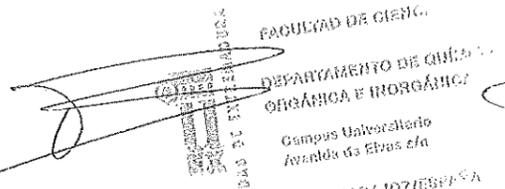
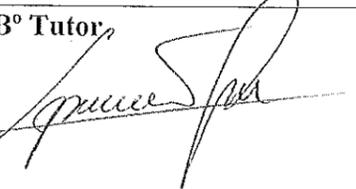
Observaciones: Se desarrollará en el laboratorio del área de Química Orgánica en Cáceres.

-TUTORES:

Nombre: Ignacio López-Coca Martín

Área de conocimiento: Química Orgánica

Fecha de aprobación del Consejo del Departamento: 27 de octubre de 2014

<p>Vº Bº Director del Departamento</p>  <p>Fd.º Eduardo Manuel Cuerda Correa</p> <p>UNIVERSIDAD DE CÁDIZ FACULTAD DE CIENC. DEPARTAMENTO DE QUÍMICA ORGÁNICA E INORGÁNICA Campus Universitario Avda de Ebas s/n 11001-BADAJOS (B.º A)</p>	<p>Vº Bº Tutor</p>  <p>Fd.º: Ignacio López-Coca Martín</p>
--	--



UNIVERSIDAD DE EXTREMADURA

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	<input checked="" type="checkbox"/>	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: 14 de octubre de 2014



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:

Química Orgánica e Inorgánica

-TÍTULO DEL TRABAJO:

Determinación de los perfiles de reacción ENE vs Diels-Alder de isopreno con enófilos mediante cálculos mecanocuánticos.

-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...)

El objetivo del trabajo es determinar los diferentes perfiles de reacción de un sistema reactivo formado por isopreno y enófilos con diferentes condicionantes estereoelectrónicos. Para ello se emplearán modelos de cálculo mecanocuánticos basados en la teoría de densidad funcional (DFT).

- Se realizará una revisión para determinar el estado del arte.
- Se definirá el método y nivel de cálculo.
- Se realizarán cálculos de optimización energética y geométrica para los reactivos y productos.
- Se calculará la geometría y energía de los estados de transición.
- Se aplicará el cálculo a diferentes sistemas para ver cómo influyen factores estereoelectrónicos.
- Se extraerán conclusiones.

Titulación: Grado en Química

Observaciones: Se desarrollará en el laboratorio del área de Química Orgánica en Cáceres.

-TUTORES:

Nombre: Ignacio López-Coca Martín

Área de conocimiento: Química Orgánica

Fecha de aprobación del Consejo del Departamento: 27 de octubre de 2014

<p>Vº Bº Director del Departamento</p>  <p>Fd.º Eduardo Manuel Cuerda Correa</p>	<p>Vº Bº Tutor</p>  <p>Fd.º: Ignacio López-Coca</p>
--	--

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

-DEPARTAMENTO DE LA UEX RESPONSABLE DE LA OFERTA:

Química Orgánica e Inorgánica

-TÍTULO DEL TRABAJO: Reacción de cicloadición 1,3-dipolar multicomponente para

la unión de fragmentos fluorescentes a ciclos de pirrolidina

- 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		<u>Experimental</u>	x	Otros (especificar)	

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

INTRODUCCIÓN

Actualmente se están realizando numerosos esfuerzos para desarrollar metodologías sencillas y rápidas para la síntesis de moléculas complejas de forma directa, sin necesidad de aislar intermedios. En este sentido, las reacciones multicomponente han emergido como una herramienta muy útil. Por otra parte, y en la misma línea de simplicidad, la reacción de cicloadición 1,3-dipolar juega un papel muy importante en la preparación eficiente de heterociclos de cinco miembros. Particularmente, la reacción de cicloadición de iluros de azometino con olefinas activadas ha llegado a ser uno de los métodos más útiles y bien establecidos para la preparación de anillos de pirrolidinas sustituidos. Este tipo de ciclos forma parte de la estructura de una variedad de productos naturales y compuestos con actividad biológica. Además, la conjugación de este tipo de sustancias a pruebas fluorescentes es una metodología de gran interés en investigación biomédica y de detección médica por imagen. En

este sentido, el fragmento 4,4-difluoro-4-bora-3a,4a-diaza-s-indaceno (BODIPY) es un fluoróforo muy importante por sus propiedades fotofísicas y su fácil disponibilidad.

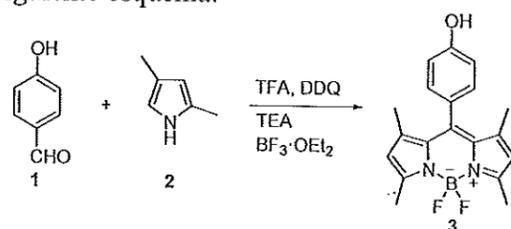
OBJETIVO

En el contexto anteriormente expuesto, el objetivo de este Proyecto Fin de Carrera sería la síntesis de anillos de pirrolidina conjugados a un fragmento de fluoróforo de BODIPY. Para ellos se utilizarán las metodologías expuestas anteriormente: una reacción de cicloadición 1,3-dipolar de forma multicomponente.

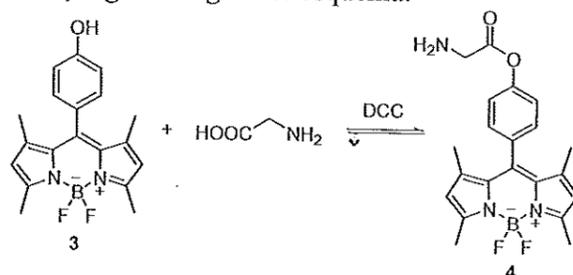
METODOLOGÍA.

La metodología a seguir en este proyecto será la siguiente:

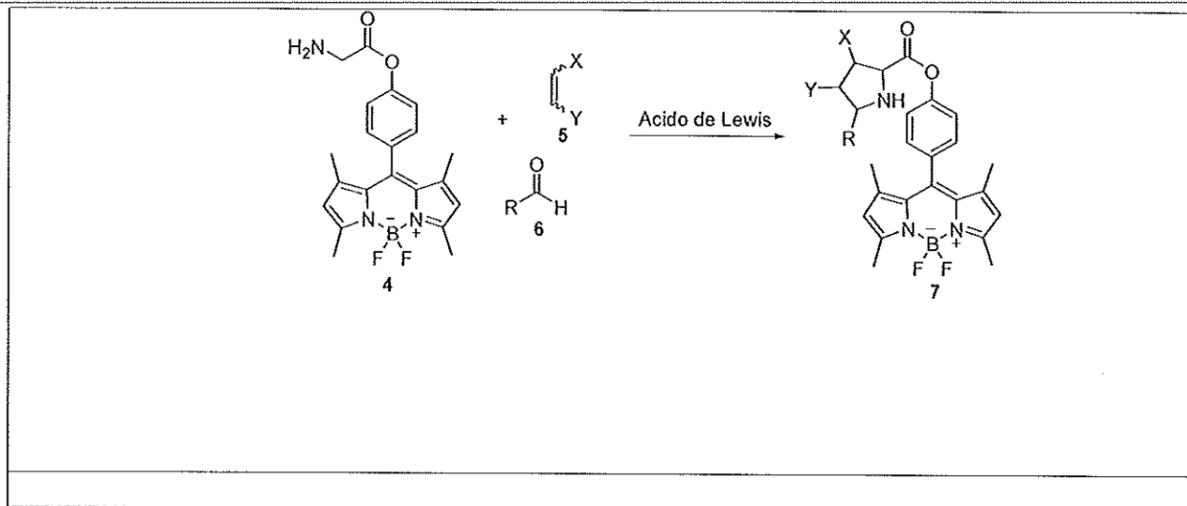
1. Revisión bibliográfica de la reacción de cicloadición 1,3-dipolar de iluros de azometino para formar anillos de pirrolidina. También será necesario revisar la bibliografía para la preparación eficiente de un α -iminoéster precursor del 1,3-dipolo necesario.
2. Preparación del α -iminoéster precursor del iluro de azometino. Este compuesto ha de presentar un fragmento BODIPY en su estructura y ser derivado de la glicina.
 - 2.1. Preparación del fragmento BODIPY: para ello se partirá del 4-hidroxifenilaldehído y de 2,4-dimetilpirrrol y se realizará conforme a la bibliografía (Chem. Commun. 2014, 50, 5455), según el siguiente esquema:



- 2.2. Síntesis de la amina precursora del α -iminoéster a partir de la esterificación de la glicina con el alcohol 3, según el siguiente esquema:



3. Reacción de cicloadición 1,3-dipolar multicomponente: consiste en preparar el α -iminoéster y el iluro de azometino en un mismo paso, partiendo de un α -aminoácido y un aldehído. Además, en el medio de reacción estará también presente un dipolarófilo que reaccionará con el iluro una vez generado éste.



Titulación: Grado en Química

Observaciones:

-TUTORES:

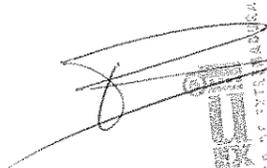
Nombre: Guadalupe Silvero Enríquez

Área de conocimiento: Química Orgánica

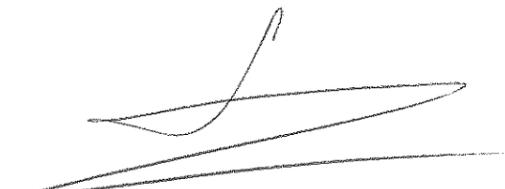
Nombre: María José Arévalo Caballero

Área de conocimiento: Química Orgánica

Fecha de aprobación del Consejo del Departamento: 27/10/14


 FACULTAD DE QUÍMICA
 DEPARTAMENTO DE QUÍMICA
 ORGÁNICA E INORGÁNICA
 Campus Universitario
 Avenida de Elvas s/n
 06071-BADAJOS/ESPAÑA

Vº Bº y Firma del Director del Dpto



Vº Bº y Firma del Tutor

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

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

-TÍTULO DEL TRABAJO: Racionalización teórica de un ejemplo de reacción 1,3-dipolar. Mecanismo de reacción y estudio computacional

- 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...)

Los cálculos de Mecánica Molecular y de Química Cuántica ocupan posiciones de relevancia creciente en la química moderna y en las disciplinas relacionadas con ésta. Tradicionalmente, estos métodos han servido para proporcionar información sobre estructuras, estabildades relativas y otras propiedades de moléculas aisladas.

La química computacional simula estructuras químicas y reacciones basándose totalmente o en parte en las leyes fundamentales de la física. Permite a los químicos sustituir o complementar estudios experimentales mediante la ejecución de cálculos en ordenadores. Aporta información extra a los estudios experimentales.

El objetivo de este trabajo será abordar el estudio teórico de la reactividad de los 3-aril-5-fenil-2-(N-metil)encilamino-1,3-tiazolio-4-olatos frente a dipolarófilos con dobles enlaces N-N.

Para ello, se han considerado los sistemas mesoiónicos 1 (Ph) y 3 (p-NO₂Ph), ya que su distinto comportamiento químico origina experimentalmente productos diferentes, y los azodipolarófilos A

(azodicarboxilato de dimetilo) y B (*N,N,N',N'*-tetrametilazodicarboxamida).

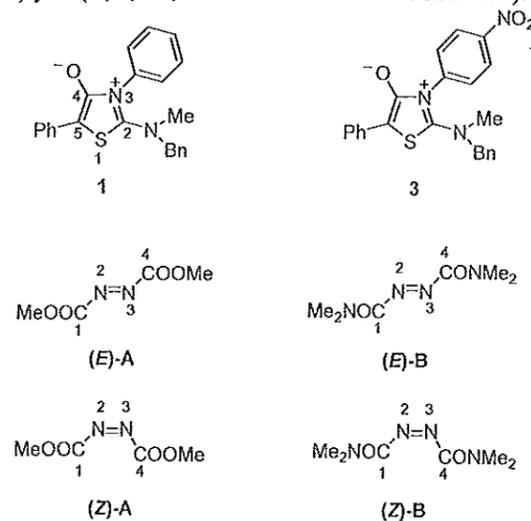


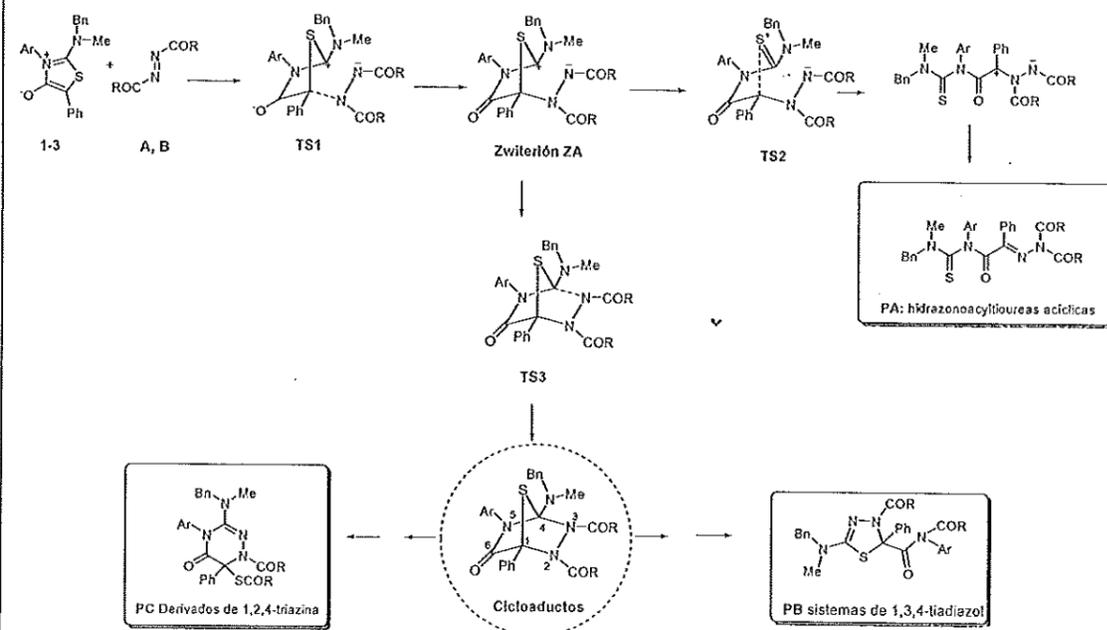
Figura 1. Reactivos considerados para el estudio teórico.

Para esta reacción 1,3-dipolar se encuentran tres productos distintos, en función de cual sea el mesoiónico y el dipolarófilo utilizados. Así mismo, cambian también las condiciones óptimas para que los procesos tengan lugar.

Se trata de utilizar el paquete de programas GAUSSIAN 09 a través de métodos DFT.

Se localizarán los puntos estacionarios del mecanismo de reacción y se caracterizarán mediante cálculos de frecuencias para verificar que los mínimos energéticos y los puntos de silla tengan cero y una frecuencias imaginarias, respectivamente.

El estudio global sería el mostrado en el siguiente esquema:



Esquema. Propuesta de Mecanismo para la reacción de los sistemas de 1,3-tiazolio-4-olato (1-3) y azodipolarófilos (A, B)

Una vez realizado el estudio computacional de este proceso, se analizarán los datos obtenidos de geometrías y energías para confirmar o descartar el mecanismo propuesto.

Titulación: GRADO EN QUÍMICA

Observaciones: El trabajo se realizará en el campus de Cáceres.

-TUTORES:

Nombre: Dra. Guadalupe Silvero Enríquez

Área de conocimiento: Química Orgánica

Nombre: Dr. Ignacio López-Coca Martín

Área de conocimiento: Química Orgánica

Nombre: Dra. M^a José Arévalo Caballero

Área de conocimiento: Química Orgánica

Fecha de aprobación del Consejo del Departamento: 27/10/14


Vº Bº y Firma del Director del Dpto


Vº Bº y Firma del Tutor

ANEXO 1
PROPUESTA DE TRABAJO FIN DE GRADO

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

-TÍTULO DEL TRABAJO: “Análisis por Inyección de Flujo de compuestos fenolicos presentes en el vino.”

- 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)	x

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

Se ha descrito en la bibliografía el interés del estudio del contenido de compuestos fenólicos por su carácter antioxidante en diferentes matrices de origen natural dado el efecto beneficioso que puede representar para la salud. Se abordará el estudio electroanalítico de diferentes fenoles utilizando diferentes tipos de electrodos entre los que se encuentran los electrodos impresos.

Por ello, se pretende abordar el estudio de algunos de estos compuestos utilizando técnicas electroanalíticas con diferentes tipos de electrodos, con el fin de iniciar a los estudiantes con el Trabajo Fin de Grado a la investigación con muestras naturales.

Entre los objetivos del TFG que se persiguen alcanzar, además de los de mostrar la adquisición de competencias disciplinares, fundamental para el ejercicio de la profesión, también se hace necesario demostrar la adquisición de otras competencias, tales como las transversales, y entre ellas, por ejemplo, la capacidad de integrarse en equipos de trabajo, adaptarse a nuevas situaciones, etc. Manejo de fuentes bibliográficas, búsquedas de antecedentes bibliográfico, utilización de metodologías de análisis en compuestos naturales, etc.

La metodología de trabajo será la siguiente:

- Definición del problema y búsqueda bibliografía
- Selección de los compuestos de interés
- Estudio electroanalítico de los compuestos de interés
- Puesta a punto del método mediante análisis de Inyección de Flujo
- Obtención de resultados
- Elaboración de las conclusiones

Observaciones: Dirigirán el TFG los doctores por la UEx: Agustina Guiberteau Cabanillas, y Elena Bernalte Morgado del Departamento de Química Analítica de la UEx,

-TUTORES:

Nombre: AGUSTINA GUIBERTEAU CABANILLAS

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

Nombre: ELENA BERNALTE MORGADO

Institución: Química Analítica. Facultad de Ciencias. Universidad de Extremadura

Fecha de aprobación del Consejo del Departamento:

23 de Octubre de 2014

Vº Bº y Firma del Tutor

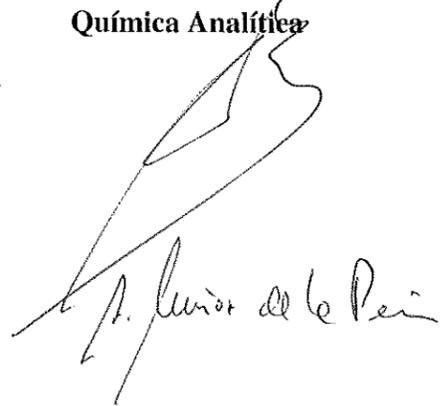
Vº Bº y Firma del Tutor



Vº Bº y Firma del Director del Dpto

Química Analítica

Vº Bº



Ilma Sra. Decana de la Facultad de Ciencias

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

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

-TÍTULO DEL TRABAJO: *Estudio electroanalítico de 5-hidroximetilfurfural y furfural 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)	x

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

El 5-hidroximetil furfural (HMF) está presente en muchos productos alimenticios tales como: miel, mostos, zumos, mermeladas etc. Su presencia puede ser una indicación del deterioro, adulteración o el estrés calórico de los azúcares que contiene estos productos y como consecuencia, la aparición del HMF. Son importantes las condiciones de almacenamiento de estos alimentos tales como la temperatura y la influencia de su exposición a la luz solar.

Por tanto, la presencia de HMF se relaciona con la frescura y como consecuencia 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 de 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 bibliográfico de los analitos seleccionados para desarrollar un método electroanalítico para la determinación de HMF en mieles

La metodología a seguir se esquematiza en los siguientes puntos:

- Revisión bibliográfica
- Estudio electroanalítico del 5-hidroxiacetilfurfural y del furfural (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 de HMF y la posible discriminación del FUR en alimentos.
- 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

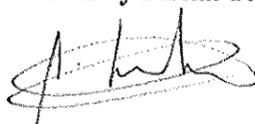
Nombre: CARMEN BELÉN GODOY CANCHO

Institución: CICYTEX- Centro de Investigación del Corcho, la Madera y el Carbón Vegetal.

GOBIERNO DE EXTREMADURA

Fecha de aprobación del Consejo del Departamento:

Vº Bº y Firma del Tutor



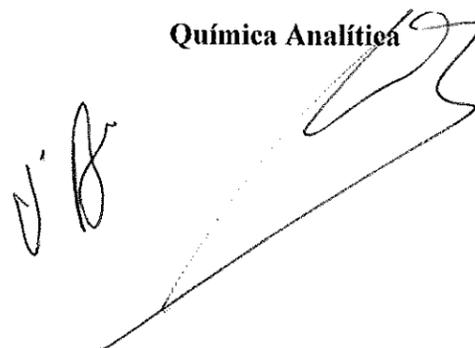
Vº Bº y Firma del Tutor

Vº Bº y Firma del Tutor



Vº Bº y Firma del Director del Dpto

Química Analítica



V.B.

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: “Comportamiento voltamperométrico de compuestos fenólicos presentes en productos de origen vegetal.”

- 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)	x

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

Los productos de origen vegetal contienen numerosos compuestos fenólicos de interés puesto que muchos presentan beneficios para la salud.

Por ello, se pretende abordar el estudio de algunos de los compuestos mayoritarios presentes en las muestras utilizando técnicas electroanalíticas con diferentes tipos de electrodos, entre los que se encuentran los electrodos impresos. Con ello se iniciará a los estudiantes del Trabajo Fin de Grado en la investigación con muestras naturales.

Consideramos que es muy importante la colaboración con los centros tecnológicos de la región y para ello el TFG propuesto se realizará, en parte, en el CICYTEX- Centro de Investigación del Corcho, la Madera y el Carbón Vegetal, del Gobierno de Extremadura, en estrecha colaboración entre ambas instituciones (CICYTEX- Centro de Investigación del Corcho, la Madera y el Carbón Vegetal).

Entre los objetivos del TFG que se persiguen alcanzar, además de los de mostrar la adquisición de

competencias disciplinares, fundamental para el ejercicio de la profesión, también se hace necesario demostrar la adquisición de otras competencias, tales como las transversales, y entre ellas, por ejemplo, la capacidad de integrarse en equipos de trabajo, trabajo en equipo, adaptarse a nuevas situaciones, etc.

Consideramos que al llevar a cabo el trabajo fin de grado en colaboración de la UEx con el CICYTEX (Centro de Investigación del Corcho, la Madera y el Carbón Vegetal), le aporta al estudiante el valor añadido de colaborar con una entidad externa a la UEx, lo que redundará, sin duda, en beneficio de su formación e intercambio de ideas y experiencias con el personal investigador del CICYTEX

Se familiarizara con:

Manejo de fuentes bibliográficas, búsquedas de antecedentes bibliográfico, utilización de metodologías de análisis en compuestos naturales, etc.

La metodología de trabajo será la siguiente:

- Definición del problema y búsqueda bibliografía
- Selección de los compuestos de interés
- Realización de la estudios básicos experimentales
- Estancia en CICYTEX- Centro de Investigación del Corcho, la Madera y el Carbón Vegetal para análisis in situ con el equipo portátil
- Tomas de muestras y análisis en el proceso por cromatografía
- Puesta a punto del método o métodos
- Obtención de resultados
- Elaboración de las conclusiones

Se propone al estudiante, sin que sea vinculante o condición indispensable para la realización del trabajo fin de grado propuesto, poder llevar a cabo las prácticas externas en CICYTEX- Centro de Investigación del Corcho, la Madera y el Carbón Vegetal, de forma regladas o no, con el objetivo adicional de poder participar de más aspectos en investigación y desarrollo en el centro CICYTEX- Centro de Investigación del Corcho, la Madera y el Carbón Vegetal que los marcados en el TFG

Observaciones: Dirigirán el TFG los doctores por la UEx: Agustina Guiberteau Cabanillas, del Departamento de Química Analítica de la UEx, la doctoranda Carmen Belén Godoy Cancho y el Dr. Manuel Alejandro Martínez Cañas, de CICYTEX- Centro de Investigación del Corcho, la Madera y el Carbón Vegetal (Gobierno de Extremadura)

-TUTORES:

Nombre: AGUSTINA GUIBERTEAU CABANILLAS

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

Nombre: MANUEL A. MARTINEZ CAÑAS

Institución: CICYTEX- Centro de Investigación del Corcho, la Madera y el Carbón Vegetal.

GOBIERNO DE EXTREMADURA

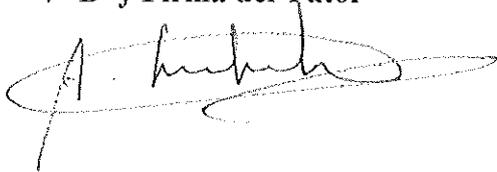
Nombre: Carmen Belén Godoy Cancho

Institución: CICYTEX- Centro de Investigación del Corcho, la Madera y el Carbón Vegetal.

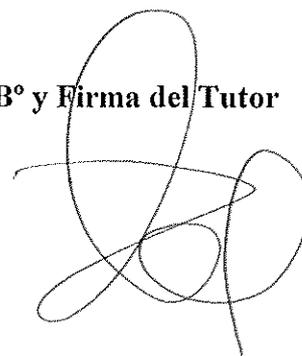
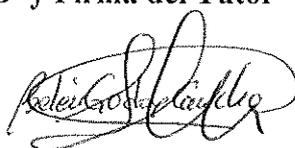
GOBIERNO DE EXTREMADURA

Fecha de aprobación del Consejo del Departamento:

Vº Bº y Firma del Tutor



Vº Bº y Firma del Tutor Vº Bº y Firma del Tutor



**Vº Bº y Firma del Director del Dpto
Química Analítica**



Vº Bº y Firma del Director General CICYTEX

Gobierno de Extremadura

Ilma Sra. Decana de la Facultad de Ciencias