

## 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	Númérico	
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:**

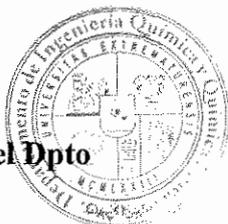
Nombre: Joaquín Espinosa García y José Carlos Corchado Martín-Romo

Área de conocimiento: Química Física

Fecha de aprobación del Consejo del Departamento:

26/10/2017

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:**

**Departamento de Expresión Gráfica**

**-TÍTULO DEL TRABAJO:**

**Aplicación de Python bajo entorno Anaconda para la modelación de una planta depuradora de lodos activos.**

**- CARACTERÍSTICAS DEL TRABAJO FIN DE GRADO**

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

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

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

El alumno aprenderá los rudimentos del sistema de programación Python en su versión de la distribución científica Ancaconda, para aplicarlos en la simulación de un conjunto biológico más decantador zonal típico de un sistema de depuración de lodos activos, todo ello basado en los modelos propuestos por IWA.

**Titulación: GRADO EN QUÍMICA**

**Observaciones:**

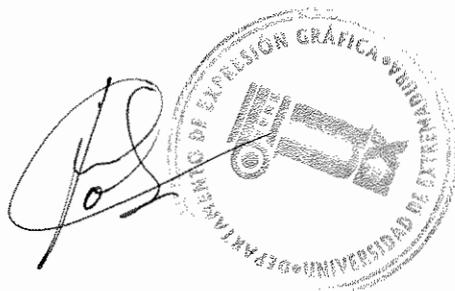
**-TUTOR/ES\*:**

Nombre: **Enrique Martínez de Salazar Martínez.**

Área de conocimiento: Proyectos

**Fecha de aprobación del Consejo del Departamento:** 2 de noviembre de 2017

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



**Vº Bº y Firma del Tutor/es**

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

*\* 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*

**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:** 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		Informe	
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: No se admitirán más de 2 alumnos para este Trabajo Fin de Grado

**-TUTORES:**

Nombre: María Luz Sánchez Mendoza, Jorge Antonio Sansón Martín, M<sup>a</sup> Elena Martín Navarro,

Jose Carlos Corchado Martín-Romo

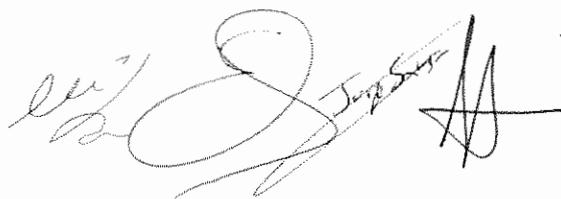
Área de conocimiento: Química Física

Fecha de aprobación del Consejo del Departamento: 26/10/2017



**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 computacional de la influencia del disolvente sobre el equilibrio conformacional de mono- y di-sacaridos”

**- 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...)

**OBJETIVO GENERAL**

Se pretende que el alumno profundice en el estudio de la influencia que la polaridad del disolvente tiene sobre el equilibrio conformacional de azúcares, esencialmente monosacáridos y disacáridos. Para ello se realizará el estudio mecano-cuántico de la estabilidad relativa de estas moléculas en presencia de disolventes de distinta polaridad empleando distintas aproximaciones teóricas. Se prestará especial atención a la influencia que las interacciones específicas (especialmente puentes de hidrógeno) tienen sobre la misma, así como al empleo de distintas técnicas computacionales para determinar las diferencias de energía libre.

## METODOLOGÍA DEL TRABAJO

Revisión de la bibliografía básica sobre la influencia del disolvente sobre los equilibrios conformacionales de azúcares.

Realización de cálculos empleando software específico (Gaussian, Moldy, ASEP/MD) orientado al cálculo de las propiedades electrónicas de moléculas en disolución.

Incorporación de los efectos del disolvente mediante distintos métodos.

Puesta a punto de métodos para el cálculo de diferencias de energía libre.

Observaciones:

### -TUTORES:

Nombre: Manuel Ángel Aguilar Espinosa

M<sup>a</sup> Luz Sánchez Mendoza

Área de conocimiento: Química Física

número máximo de alumnos: 2

Fecha de aprobación del Consejo del Departamento:

26/10/2017



V<sup>o</sup> B<sup>o</sup> y Firma del Director del Dpto

V<sup>o</sup> B<sup>o</sup> y Firma de los Tutores

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:** “Estudio computacional de la influencia del disolvente sobre espectros electrónicos de moléculas que sufren transferencia protónica en el estado excitado”

### - 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...)

#### OBJETIVO GENERAL

Se pretende que el alumno profundice en el estudio de la influencia que la polaridad del disolvente tiene sobre los espectros de moléculas de interés químico y biológico. Para ello realizará el estudio mecano-cuántico de los espectros electrónicos de moléculas en presencia de disolventes de distinta polaridad empleando distintas aproximaciones teóricas. Se prestará especial atención a la influencia que las interacciones específicas (especialmente puentes de hidrógeno) tengan sobre los espectros de absorción y emisión. Las moléculas elegidas serán aquellas en las que se ha propuesto la existencia de reacciones de transferencia protónica en el estado excitado, fundamentalmente de la 3-hidroxiflavona, benzazol y benzofenonas.

## METODOLOGÍA DEL TRABAJO

Revisión de la bibliografía básica sobre la influencia del disolvente sobre espectros electrónicos.  
Realización de cálculos empleando software específico orientado al cálculo de espectros electrónicos de moléculas.  
Incorporación de los efectos del disolvente mediante distintos métodos.

Titulación: Grado en Química

Observaciones:

### -TUTORES:

Nombre: Manuel Ángel Aguilar Espinosa

M<sup>a</sup> Elena Martín Navarro

Área de conocimiento: Química Física

número máximo de alumnos: 2

Fecha de aprobación del Consejo del Departamento: 26/10/2017



V<sup>o</sup> B<sup>o</sup> y Firma del Director del Dpto



V<sup>o</sup> B<sup>o</sup> y Firma de los Tutores

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 en Educación Secundaria, referidos a los equilibrios químicos en disolución”.*

**- 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	X	Experimental
Trabajos de investigación o de investigación y desarrollo (Tipo C)	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 utilizados en Extremadura
- R. Chang; "Química", 10ª Ed., McGraw-Hill (2010)
- R. H. Petrucci, F. G. Herring, J. D. Madura, C. Bissonnette; "Química General. Principios y aplicaciones modernas", 11ª Ed., Pearson (2017)
- J. A. Sánchez, Trabajo Fin de Grado, UEx-Fac. Ciencias (Septiembre 2017)
- Internet

Titulación:

**GRADO en QUÍMICA**

Observaciones:

**-TUTOR/ES\*:**

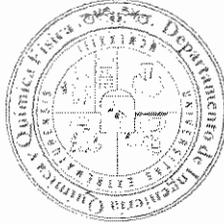
Nombre: **Dr. Evaristo A. OJALVO SÁNCHEZ** (evaristo@unex.es) (Prof. Titular Q. Física) y  
**D. José Antonio SÁNCHEZ BARRIGA** (jsanchezsw@alumnos.unex.es)  
 (Alumno de Máster - Facultad Ciencias - UEx)

Área de conocimiento: **Química Física**

Fecha de aprobación del Consejo del Departamento:

26/10/2017

Vº Bº y Firma del Director del Dpto

Vº Bº y Firma de los Tutores

\* 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  
**Decanato de la Facultad de Ciencias**



UNIVERSIDAD DE EXTREMADURA

FACULTAD DE CIENCIAS

GRADO EN QUIMICA

## ANEXO 1 PROPUESTA DE TRABAJO FIN DE GRADO

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

-TÍTULO DEL TRABAJO: “Estudios electroanalítico de compuestos flavonoides presentes en alimentos. Cuantificación”

- 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 interés del análisis de compuestos naturales presentes en diferentes alimentos es de gran actualidad. Dentro de la gran variedad de compuestos presentes en diferentes alimentos se encuentran los compuestos flavonoides que son productos de origen vegetal que muestran actividad antioxidante y que se ha mostrado que son beneficiosos para la salud. Por ello, se pretende abordar el estudio de algunos de estos compuestos utilizando técnicas electroanalíticas utilizando diferentes tipos de electrodos impresos de carbono así como sus posibles modificaciones (grafeno, nanotubos de carbono) el objetivo es iniciar a los estudiantes en la investigación con muestras de alimentos y el desarrollo o propuesta de métodos de análisis

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, concretamente en el INTAEX.

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, entre otras competencias.

Consideramos que al llevar a cabo el trabajo fin de grado en colaboración de la UEx con el CICYTEX (INTAEX) le aporta al estudiante el valor añadido como es poder 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 de CICYTEX (concretamente en el INTAEX)

Otros objetivos son:

Manejo de fuentes bibliográficas y búsquedas de antecedentes bibliográfico de los analitos seleccionados

Utilización de metodologías de análisis en compuestos naturales

Por otra parte, la metodología de trabajo será la siguiente:

- Planteamiento del problema (analitos posibles en estudio y matriz en la que se pretende analizar) y búsqueda bibliografía
- Selección de los compuestos de interés
- Realización experimental de los estudios básicos
- Estancia en CICYTEX- INTAEX
- Puesta a punto del método o métodos propuestos
- Discusión de resultados y aplicaciones
- 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- INTAEX, de forma regladas o no, con el objetivo adicional de poder participar de mas aspectos en investigación y desarrollo en CICYTEX (INTAEX) 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 y el Dr. Manuel Alejandro Martínez Cañas, de CICYTEX- INTAEX )

#### **TUTORES:**

Nombre: AGUSTINA GUIBERTEAU CABANILLAS

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

Nombre: MANUEL A. MARTINEZ CAÑAS

Institución: CICYTEX- INTAEX (Instituto Tecnológico Agroalimentario de Extremadura, de la JUNTA DE EXTREMADURA

Fecha de aprobación del Consejo del Departamento:

30 OCT. 2017

Vº Bº y Firma del Tutor

Vº Bº y Firma del Tutor



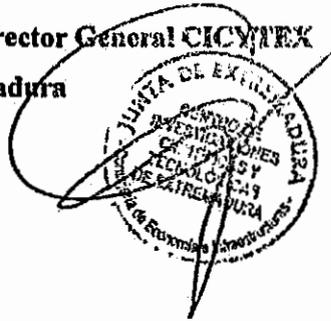
Vº Bº y Firma del Director del Dpto

Química Analítica



Vº Bº y Firma del Director General CICYTEX

Gobierno de Extremadura



Ilma Sra. Decana de la Facultad de Ciencias



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 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)	

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

El 5-hidroximetil furfural y el furfural están presente en muchos productos alimenticios Su presencia puede ser una indicación del deterioro, adulteración o el estrés calórico de los azúcares que contiene productos y como consecuencia la aparición del HMF y/o Furfural. Hay que tener en cuenta que la condición de almacenamiento de los alimentos puede influir, tal como la temperatura la exposición a la luz solar etc. Por tanto, la presencia de 5-hidroximetilfurfural como de furfural se relaciona con la frescura y por tanto con la calidad de estos productos alimenticios y 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 bibliográfico de los analitos seleccionados para desarrollar métodos para la determinación de ambos compuestos mediante métodos electroanalítico utilizando técnicas quimiométricas

La metodología a seguir se esquematiza en los siguientes puntos

- Revisión bibliográfica
- Estudio electroanalítico del 5-hidroximetilfurfural y del furfural 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 FU 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

**-TUTORES:**

Nombre: AGUSTINA GUIBERTEAU CABANILLAS

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

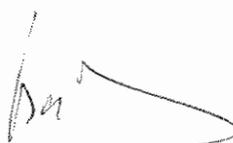
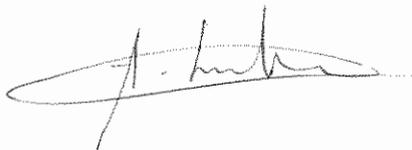
Nombre: ISABEL DURÁN MARTÍN MERÁS

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

Fecha de aprobación del Consejo del Departamento: 30 OCT. 2017

Vº Bº y Firma del Tutor

Vº Bº y Firma del Tutor



Vº Bº y Firma del Director del Dpto

Química Analítica



**Ilma Sra. Decana de la Facultad de Ciencias**



UNIVERSIDAD DE EXTREMADURA

FACULTAD DE CIENCIAS

GRADO EN QUIMICA

## ANEXO 1 PROPUESTA DE TRABAJO FIN DE GRADO

**-DEPARTAMENTO DE LA UEx RESPONSABLE DE LA OFERTA: QUÍMICA ANALÍTICA**

**-TÍTULO DEL TRABAJO:** “Estudios electroanalítico de fluoroquinolonas de cuarta generación. Aplicaciones analíticas de sus mezclas binarias”

### - CARACTERÍSTICAS DEL TRABAJO FIN DE GRADO

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

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

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

Se pretende abordar el estudio electroanalítico de antibióticos pertenecientes a la familia de las fluoroquinolonas, utilizando diferentes técnicas electroanalíticas y electrodos de trabajo (electrodo electrodos impresos de carbono modificados o no).

Las fluoroquinolonas de cuarta generación se utilizan para el tratamiento de infecciones microbianas por lo cual es de interés su determinación en diferentes matrices biológicas y en formulaciones farmacéuticas

Los objetivos son:

- Llevar a cabo con el TFG un trabajo de investigación, iniciando el camino, para la propuesta de métodos analíticos para la determinación de mezclas binarias de fluoroquinolonas y su aplicación a muestras reales
- Utilización de bases de datos para la revisión de antecedentes bibliográfico referente a los métodos de análisis de los analitos seleccionados

## METODOLOGÍA

- Revisión bibliográfica
- Realización de estudios electroanalíticos básicos utilizando diferentes electrodos
- Puesta a punto del/los métodos desarrollados
- Elaboración de las conclusiones
- Redacción de la memoria del TFG

Se pretende que se inicie en trabajo de investigación y que adquiera competencias, además de académicas, diferentes competencias transversales recogidas en la Memoria de Verificación del Grado en Química.

Observaciones: Dirigirán el TFG los doctores por la Uex: Agustina Guiberteau Cabanillas, del departamento de química analítica de la UEX

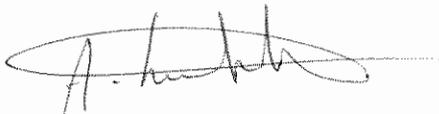
## TUTORES:

Nombre: AGUSTINA GUIBERTEAU CABANILLAS

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

Fecha de aprobación del Consejo del Departamento: 30 OCT. 2017

Vº Bº y Firma del Tutor



Vº Bº y Firma del Tutor

Vº Bº y Firma del Director del Dpto

Química Analítica



**Ilma Sra. Decana de la Facultad de Ciencias**



UNIVERSIDAD DE EXTREMADURA

FACULTAD DE CIENCIAS

Rellenar a ordenador

## ANEXO 1 PROPUESTA DE TRABAJO FIN DE GRADO

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

**-TÍTULO DEL TRABAJO:**

ESTUDIO DE UNA REACCIÓN DE DERIVATIZACIÓN DE AMINAS BIÓGENAS POR ELECTROFORESIS CAPILAR.

**- CARACTERÍSTICAS DEL TRABAJO FIN DE GRADO**

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

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

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

El principal objetivo de este trabajo es aprender una técnica de separación Electroforesis Capilar, estudiada en la asignatura Técnicas Analíticas de Separación e Hibridación Instrumental, obligatoria de 3º Curso del Grado de Química.

Inicialmente se llevará a cabo una revisión bibliográfica sobre los antecedentes bibliográficos acerca de la determinación de aminas biógenas por electroforesis capilar y las reacciones de derivatización empleadas. Para ello se manejará el material bibliográfico de que dispone el Departamento de Química Analítica. Se aprenderá, de esta forma, a realizar una búsqueda bibliográfica, manejar correctamente las referencias y sintetizar los trabajos seleccionados.

Una vez realizada la búsqueda bibliográfica, se elegirá una reacción de derivatización que transcurra en poco tiempo y se aplicará a una amina biógena que presente señal por sí misma

para conocer en qué extensión transcurre la derivatización. Se obtendrá el electroferograma de la amina biógena por sí sola y aplicando la reacción de derivatización. De ello se deducirán parámetros electroforéticos importantes. Se procederá al estudio de la reacción de derivatización: influencia del pH, temperatura, concentración de reactivo derivatizante, etc y otros factores instrumentales. De esta forma se fabricará un capilar y se instalará en el equipo, se aprenderá el manejo del equipo y se comprenderá los fundamentos de la técnica vistos en clase de teoría.

Si es posible, se intentará llevar a cabo la reacción de derivatización en el mismo capilar lo que supondría ahorro de tiempo y reactivos. Así se profundizará en la comprensión de las movilidades electroforéticas.

Finalmente se estudiará la relación entre señal y concentración para, si fuera posible, aplicar el método optimizado a la determinación de aminas biógenas en alguna muestra.

Para el adiestramiento en la técnica, se utilizará el equipo de Electroforesis capilar del que dispone el departamento.

Titulación: Grado en Química

Observaciones: Haber superado las asignaturas de Química Analítica.

**-TUTOR/ES\*:**

Nombre: **M<sup>a</sup> ISABEL ACEDO VALENZUELA**

Área de conocimiento: **QUÍMICA ANALÍTICA**

**Fecha de aprobación del Consejo del Departamento: 30 OCT. 2017**

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



*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*

**Decanato de la Facultad de Ciencias**

**Vº Bº y Firma del Tutor/es**



UNIVERSIDAD DE EXTREMADURA

FACULTAD DE CIENCIAS

Rellenar a ordenador

## ANEXO 1 PROPUESTA DE TRABAJO FIN DE GRADO

**-DEPARTAMENTO DE LA UEX RESPONSABLE DE LA OFERTA:**

Química Orgánica e Inorgánica

**-TÍTULO DEL TRABAJO:**

Reacciones de enol-Ugi para la síntesis de intercalantes fluorescentes de ácidos nucleicos con aplicación en el transporte intracelular de ADN.

**- 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	X
Trabajos de investigación o de investigación y desarrollo (Tipo C)	Otros (especificar)			

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

El objetivo del trabajo es la síntesis de nuevos compuestos intercalantes del ADN. Para ello explotaremos una reacción multicomponente de isonitrilos recientemente desarrollada en nuestros laboratorios, que nos proporcionará una herramienta inmejorable para este fin. Utilizando técnicas espectroscópicas, simulación computacional, ensayos biológicos y electrofisiológicos, seleccionaremos los mejores candidatos que servirán de base para el desarrollo de nuevas sondas moleculares específicas para el estudio "in vivo" del ADN nuclear y mitocondrial.

Titulación: Grado en Química

Observaciones: El trabajo se realizará íntegramente en el Campus de Cáceres

**-TUTOR/ES\*:**

Nombre: Ana M<sup>a</sup> Gómez Neo, Jesús Díaz Álvarez, Ana Bornadiego Suárez

Área de conocimiento: Química Orgánica

**Fecha de aprobación del Consejo del Departamento: 31-10-2017**

LOPEZ-COCA  
MARTIN IGNACIO  
- 26009416G

Firmado digitalmente por LOPEZ-COCA MARTIN IGNACIO - 26009416G  
Nombre de reconocimiento (DN):  
c=ES, serialNumber=26009416G,  
sn=LOPEZ-COCA MARTIN,  
givenName=IGNACIO, cn=LOPEZ-COCA MARTIN IGNACIO - 26009416G  
Fecha: 2017.10.31 12:41:03 +01'00'

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

**Vº Bº y Firma del Tutor/es**

DIAZ  
ALVAREZ  
JESUS -  
52965327F

Firmado digitalmente por DIAZ ALVAREZ JESUS - 52965327F  
Nombre de reconocimiento (DN): c=ES, serialNumber=52965327F, sn=DIAZ ALVAREZ, givenName=JESUS, cn=DIAZ ALVAREZ JESUS - 52965327F  
Fecha: 2017.10.30 10:33:12 +01'00'

*\* 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*

**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:** Estudio teórico de la determinación estructural de materiales carbonosos mediante técnicas de espectroscopia electrónica.

**- 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 <b>X</b>	Experimental
Trabajos de investigación o de investigación y desarrollo (Tipo C)	Otros (especificar)		

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

El objetivo es dar una explicación teórica, mediante cálculos de mecánica molecular (DFT o similar), a los procesos electrónicos implicados en las espectroscopias fotoelectrónicas utilizadas en la determinación de los distintos grupos funcionales que pueden presentarse en un material carbonoso, facilitando de esta forma su análisis experimental.

Titulación: Grado en Química

Observaciones:

**-TUTOR/ES\*:**

Nombre: Carlos Javier Durán Valle

Área de conocimiento: Química Inorgánica

**Fecha de aprobación del Consejo del Departamento:** 31 de Octubre de 2017

LOPEZ-COCA  
MARTIN IGNACIO  
- 26009416G

Firmado digitalmente por LOPEZ-COCA  
MARTIN IGNACIO - 26009416G  
Nombre de reconocimiento (DN): c=ES,  
serialNumber=26009416G, sn=LOPEZ-  
COCA MARTIN, givenName=IGNACIO,  
cn=LOPEZ-COCA MARTIN IGNACIO -  
26009416G  
Fecha: 2017.10.31 12:42:31 +01'00'

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

**Vº Bº y Firma del Tutor/es**

*\* 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*

**Decanato de la Facultad de Ciencias**

## ANEXO 1 PROPUESTA DE TRABAJO FIN DE GRADO

**-DEPARTAMENTO DE LA UEX RESPONSABLE DE LA OFERTA:**

**-TÍTULO DEL TRABAJO:** Estudio de la eficiencia catalítica de sólidos ecocompatibles en la síntesis de compuestos  $\beta$ -aminocarbonílicos.

**- 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	X
Trabajos de investigación o de investigación y desarrollo (Tipo C)	Otros (especificar)			

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

Uno de los objetivos de la investigación en Química Orgánica es la obtención de moléculas diversamente funcionalizadas que sirvan de precursoras en la obtención de sustancias con actividad biológica. En este campo, los compuestos  $\beta$ -aminocarbonílicos han ganado creciente importancia como precursores de aminoalcoholes, aminoácidos y lactamas funcionalizados. En el presente trabajo se explorará la actividad catalítica de sólidos ecocompatibles en la reacción de Mannich para investigar la posible mejora en la selectividad y en las condiciones de reacción, buscando las más sostenibles posibles.

Titulación: Grado en Química

Observaciones: El trabajo se desarrollará parcial o totalmente en las instalaciones del departamento en Cáceres.

**-TUTOR/ES\*:**

Nombre: Carlos Javier Durán Valle

Área de conocimiento: Química Inorgánica

Nombre: Ignacio López-Coca Martín

Área de conocimiento: Química Orgánica

Nombre: Guadalupe Silvero Enríquez

Área de conocimiento: Química Orgánica

**Fecha de aprobación del Consejo del Departamento: 31-10-2017**

LOPEZ-COCA  
MARTIN IGNACIO  
- 26009416G

Firmado digitalmente por LOPEZ-COCA MARTIN IGNACIO - 26009416G  
Nombre de reconocimiento (DN):  
c=ES, serialNumber=26009416G,  
sn=LOPEZ-COCA MARTIN,  
givenName=IGNACIO, cn=LOPEZ-COCA MARTIN IGNACIO - 26009416G  
Fecha: 2017.10.31 12:39:35 +01'00'

LOPEZ-COCA  
MARTIN  
IGNACIO -  
26009416G

Firmado digitalmente por LOPEZ-COCA MARTIN IGNACIO - 26009416G  
Nombre de reconocimiento (DN):  
c=ES, serialNumber=26009416G,  
sn=LOPEZ-COCA MARTIN,  
givenName=IGNACIO, cn=LOPEZ-COCA MARTIN IGNACIO - 26009416G  
Fecha: 2017.10.31 12:39:14 +01'00'

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

**Vº Bº y Firma del Tutor/es**

*\* 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*

**Decanato de la 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:** Generación de estructuras prebióticas oligoméricas a partir de glioxal

**- 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	x
Trabajos de investigación o de investigación y desarrollo (Tipo C)	Otros (especificar)			

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

El objetivo último de este trabajo es contribuir al entendimiento de los procesos de evolución molecular que debieron producirse previamente a la aparición de la vida. Se estudian las estructuras que se generan en la reacción de moléculas de baja masa molecular, pero cuya existencia prebiótica está documentada por su observación espectroscópica en el espacio exterior. El carácter bidentado de algunas de estas moléculas, como glioxal, cianamida, formamidina, guanidina, etc. permite la formación de estructuras oligoméricas que pudieron estar presentes en la oferta de moléculas disponibles entre las que la vida pudo escoger. El trabajo experimental une experiencias sintéticas, junto con el análisis de determinación estructural necesario para la demostración de la arquitectura de estos oligómeros.

Titulación: Grado en Química

Observaciones:

**-TUTOR/ES\*:**

Nombre: Reyes Babiano Caballero y Pedro Cintas Moreno

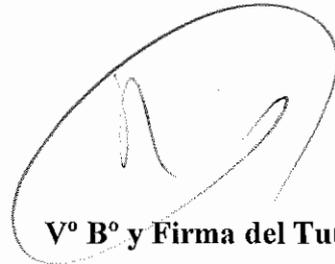
Área de conocimiento: Química Orgánica.

**Fecha de aprobación del Consejo del Departamento:** 31 de Octubre de 2017

LOPEZ-COCA  
MARTIN IGNACIO  
- 26009416G

Firmado digitalmente por LOPEZ-COCA  
MARTIN IGNACIO - 26009416G  
Nombre de reconocimiento (DN): c=ES,  
serialNumber=26009416G, sn=LOPEZ-COCA  
MARTIN, givenName=IGNACIO, cn=LOPEZ-  
COCA MARTIN IGNACIO - 26009416G  
Fecha: 2017.10.31 12:41:38 +01'00'

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



**Vº Bº y Firma del Tutor/es**

*\* 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*

**Decanato de la 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:** Reacciones de economía atómica total. Reacciones de cicloadición a alta presión.

**- 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	x
Trabajos de investigación o de investigación y desarrollo (Tipo C)	Otros (especificar)			

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

La denominada "Química Verde" tiene por objeto desarrollar nuevas metodologías sintéticas que sean respetuosas con el medio ambiente. Se pretende que las nuevas reacciones no sean contaminantes, sus materias primas sean de origen renovable y que sean de elevada economía atómica; es decir, que toda o la mayor parte de la materia aportada por los reactivos quede incorporada en los productos finales. En este sentido las reacciones de cicloadición son el ejemplo perfecto de economía atómica total. Las materias primas para la cicloadición serán azoalquenos ópticamente activos derivados de monosacáridos, sustancias estas de fácil acceso ya que son fotosintetizadas por las plantas. La reacción de estas sustancias diénicas (azoalquenos)

con diversos dienófilos (carbonados o no) permitirá preparar una amplia variedad de sustancias heterocíclicas quirales. Estas reacciones se realizarán a alta presión (aproximadamente 10.000 atmósferas), lo que permitirá acortar los tiempos de reacción, evitará las reacciones colaterales indeseables asociadas al calentamiento del medio de reacción y permitirá llevar a cabo reacciones que a presión atmosférica no ocurren o lo hacen con extrema lentitud.

Titulación: Grado en Química

Observaciones:

**-TUTOR/ES\*:**

Nombre: Juan Carlos Palacios Albarrán y Reyes Babiano Caballero

Área de conocimiento: Química Orgánica

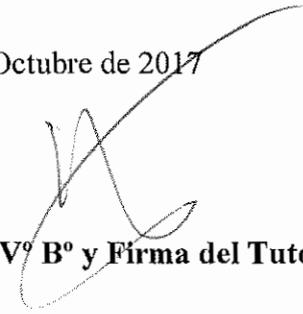
**Fecha de aprobación del Consejo del Departamento:** 31 de Octubre de 2017

LOPEZ-COCA  
MARTIN IGNACIO  
- 26009416G

Firmado digitalmente por LOPEZ-COCA  
MARTIN IGNACIO - 26009416G  
Nombre de reconocimiento (DN): c=ES,  
serialNumber=26009416G, sn=LOPEZ-COCA  
MARTIN, givenName=IGNACIO, cn=LOPEZ-  
COCA MARTIN IGNACIO - 26009416G  
Fecha: 2017.10.31 12:37:51 +01'00'

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

**Vº Bº y Firma del Tutor/es**



*\* 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*

**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: La magnitud física "acción": concepto, significación y su papel determinante en los procesos químicos y químico-físicos.**

**- CARACTERÍSTICAS DEL TRABAJO FIN DE GRADO**

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

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

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

**OBJETIVOS.-**

1. Involucrar a los estudiantes en la tarea intelectual del proceso de aprendizaje.
2. Desarrollar en los estudiantes habilidades/capacidades de comprensión, interpretación, aplicación y transmisión (oral y escrita) de sus conocimientos químicos
3. 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.-**

1. Interpretar los conceptos básicos de la Física microscópica y los principios fundamentales de la Química Cuántica.
2. Identificar las características de los diferentes estados de la materia y de las teorías empleadas para describirlos.
3. Comprender el significado último de una reacción química, en base a las magnitudes físicas que se ponen en juego.
4. Asimilar la relación entre propiedades macroscópicas y propiedades microscópicas.

5. Evaluación, interpretación y síntesis de datos físicos e información química.
6. Conocimiento de una lengua extranjera (preferiblemente inglés).
7. Capacidad de relación de la Química con otras disciplinas.
8. Capacidad de: abstracción de conceptos, análisis y síntesis de ideas, organización y planificación de procesos, trabajo en un contexto internacional, manejo de bibliografía científica, ejercitación y expresión oral y escrita, razonamiento crítico y resolución de problemas, toma de decisiones y trabajo en equipo.
9. Capacidad de comunicar, clara y precisa, conceptos y conocimientos complejos a un público especializado y no especializado.
10. Capacidad de aprehender conceptos y conocimientos que le permitan emprender estudios posteriores con autonomía.
11. Desarrollo de habilidades de aprendizaje personal.

**METODOLOGÍA.-**

1. Revisión bibliográfica.
2. Organización y categorización de la bibliografía.
3. Comparación y contraste de conceptos definitorios, especialmente de la "acción" y el "momento angular" en partículas microscópicas.
4. Implicaciones relativistas en el concepto de "espín".
5. El "espín" en Química.

**BIBLIOGRAFÍA BÁSICA.-**

1. "Física Elemental para químicos", F.J. Olivares del Valle, Universitas Editorial, 1998.

Titulación: *Grado en Química*

Observaciones:

**-TUTORES:**

Nombre: *Francisco J. Olivares del Valle*

Área de conocimiento: *Química Física*

Fecha de aprobación del Consejo del Departamento:

*26/10/2017*




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: Ingeniería Química y Química Física

-TÍTULO DEL TRABAJO: Equilibrios tautoméricos en las bases de ADN. La Timina en fase gas y disolución acuosa.

- CARACTERÍSTICAS DEL TRABAJO FIN DE GRADO

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

Table with 6 columns and 3 rows. Columns: Teórico, X, Revisión e investigación bibliográfica, X, Numérico, X. Row 2: Proyectos de ingeniería, Proyectos de diseño industrial, Informes. Row 3: Computacional, X, Experimental, Otros (especificar).

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

OBJETIVOS.-

- 1. Involucrar a los estudiantes en la tarea intelectual del proceso de aprendizaje.
2. Desarrollar en los estudiantes habilidades/capacidades de comprensión, interpretación, aplicación y transmisión (oral y escrita) de sus conocimientos químicos.
3. 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.-

- 1. Interpretar los conceptos básicos de la Física microscópica y los principios fundamentales de la Química Cuántica.
2. Identificar las características de los diferentes estados de la materia y de las teorías empleadas para describirlos.
3. Comprender el significado último de una reacción tautomérica, en base a las magnitudes físicas que se ponen en juego.
4. Asimilar la relación entre propiedades macroscópicas y propiedades microscópicas.

5. Evaluación, interpretación y síntesis de datos físicos e información química.
6. Conocimiento de una lengua extranjera (preferiblemente inglés).
7. Capacidad de relación de la Química con otras disciplinas.
8. Capacidad de: abstracción de conceptos, análisis y síntesis de ideas, organización y planificación de procesos, trabajo en un contexto internacional, manejo de bibliografía científica, ejercitación y expresión oral y escrita, razonamiento crítico y resolución de problemas, toma de decisiones y trabajo en equipo.
9. Capacidad de comunicar, clara y precisa, conceptos y conocimientos complejos a un público especializado y no especializado.
10. Capacidad de aprehender conceptos y conocimientos que le permitan emprender estudios posteriores con autonomía.
11. Desarrollo de habilidades de aprendizaje personal.

**METODOLOGÍA.-**

1. Revisión bibliográfica.
2. Organización y categorización de la bibliografía.
3. Cálculos teóricos.
4. Comparación y contraste de conceptos definitorios, especialmente del "equilibrio" y la "tautomería" en moléculas químicas de interés especial (ADN).
5. Efectos del disolvente en el proceso tautomérico.

Titulación: *Grado en Química*

Observaciones:

**-TUTORES:**

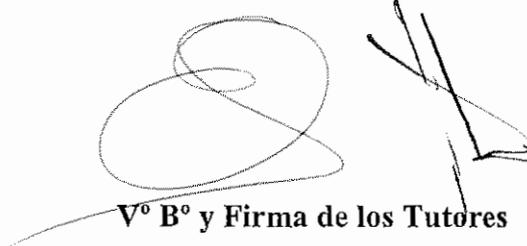
Nombre: *María Elena Martín Navarro y Francisco J. Olivares del Valle*

Área de conocimiento: *Química Física*

Fecha de aprobación del Consejo del Departamento: *26/10/2017*


Vº Bº y Firma del Director del Dpto



Vº Bº y Firma de los Tutores

Decanato de la Facultad de Ciencias



UNIVERSIDAD DE EXTREMADURA

FACULTAD DE CIENCIAS

PROPUESTA DE TRABAJO FIN DE GRADO

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

-TÍTULO DEL TRABAJO: Estudio cuántico sistemático de un sistema poli-electrónico bi-molecular: el dímero de agua.

- CARACTERÍSTICAS DEL TRABAJO FIN DE GRADO

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

Table with 6 columns and 3 rows. Columns: Teórico, X, Revisión e investigación bibliográfica, X, Numérico, X. Row 2: Proyectos de ingeniería, Proyectos de diseño industrial, Informes. Row 3: Computacional, X, Experimental, Otros (especificar).

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

OBJETIVOS.-

- 1. Involucrar a los estudiantes en la tarea intelectual del proceso de aprendizaje y planificación.
2. Desarrollar en los estudiantes habilidades/capacidades de comprensión, interpretación, aplicación y transmisión (oral y escrita) de sus conocimientos químicos.
3. 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.-

- 1. Interpretar los conceptos básicos y los principios fundamentales de la Química Cuántica.
2. Identificar las características de las interacciones no reactivas y de las teorías empleadas para describirlos.
3. Comprender el significado último de una interacción bi-molecular, en base a las magnitudes químico-físicas que se ponen en juego.
4. Asimilar la relación entre propiedades macroscópicas y propiedades microscópicas.
5. Evaluación, interpretación y síntesis de datos físicos e información química.
6. Conocimiento de una lengua extranjera (preferiblemente inglés).

7. Capacidad de relación de la Química con otras disciplinas.
8. Capacidad de: abstracción de conceptos, análisis y síntesis de ideas, organización y planificación de procesos, trabajo en un contexto internacional, manejo de bibliografía científica, ejercitación y expresión oral y escrita, razonamiento crítico y resolución de problemas, toma de decisiones y trabajo en equipo.
9. Capacidad de comunicar, clara y precisa, conceptos y conocimientos complejos a un público especializado y no especializado.
10. Capacidad de aprehender conceptos y conocimientos que le permitan emprender estudios posteriores con autonomía.
11. Desarrollo de habilidades de aprendizaje personal.

#### **METODOLOGÍA Y CÁLCULOS.-**

1. Revisión bibliográfica sobre interacciones moleculares y problemática asociada.
2. Organización y categorización de la bibliografía.
3. Cálculos teóricos. Planificación y ejecución.
4. Comparación y contraste de las propiedades calculadas.
5. El dímero de agua. Especies lineal, cíclica y bifurcada. Comparación de propiedades.

Titulación: *Grado en Química*

Observaciones:

#### **-TUTORES:**

Nombre: *María Elena Martín Navarro y Francisco J. Olivares del Valle*

Área de conocimiento: *Química Física*

Fecha de aprobación del Consejo del Departamento:

*26/10/2017*



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

**Vº Bº y Firma de los Tutores**

**Decanato de la Facultad de Ciencias**

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

**-DEPARTAMENTO DE LA UEX RESPONSABLE DE LA OFERTA:**

Departamento de Expresión Gráfica

**-TÍTULO DEL TRABAJO:**

Aplicación de Python bajo entorno Anaconda para la modelación de una planta depuradora de lodos activos.

**- CARACTERÍSTICAS DEL TRABAJO FIN DE GRADO**

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

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

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

El alumno aprenderá los rudimentos del sistema de programación Python en su versión de la distribución científica Anaconda, para aplicarlos en la simulación de un conjunto biológico más decantador zonal típico de un sistema de depuración de lodos activos, todo ello basado en los modelos propuestos por IWA.

Titulación: GRADO EN QUÍMICA

Observaciones:

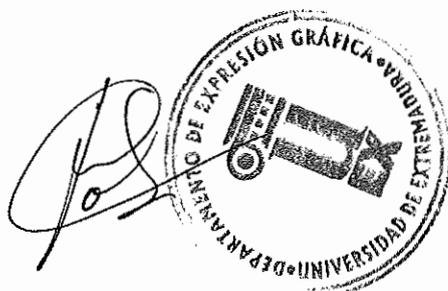
**-TUTOR/ES\*:**

Nombre: **Enrique Martínez de Salazar Martínez.**

Área de conocimiento: Proyectos

**Fecha de aprobación del Consejo del Departamento: 2 de noviembre de 2017**

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



**Vº Bº y Firma del Tutor/es**

A handwritten signature in black ink, consisting of several loops and a long tail, positioned to the right of the stamp.

*\* 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*

**Decanato de la Facultad de Ciencias**