

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

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

**-TÍTULO DEL TRABAJO:** *Caminando sobre superficies de energía potencial*

**- CARACTERÍSTICAS DEL TRABAJO FIN DE GRADO**

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

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

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

**OBJETIVOS**

Involucrar a los estudiantes en la tarea intelectualmente estimulante y satisfactoria del proceso de aprendizaje.  
 Desarrollar en los estudiantes habilidades/capacidades de comprensión, interpretación, aplicación y transmisión (de forma oral y por escrito) de sus conocimientos químicos, teóricos y prácticos.  
 Proporcionar a los estudiantes una base de conocimientos y habilidades con los que pueda continuar sus estudios en áreas especializadas de la Química o en áreas multidisciplinares.

**COMPETENCIAS**

Interpretar las estructura atómica y los principios de química cuántica.  
 Identificar las características de los diferentes estados de la materia y las teorías empleadas para describirlos.  
 Diferenciar los tipos principales de reacción química. Principios de termodinámica, cinética y electroquímica.  
 Asimilar la relación entre propiedades macroscópicas y propiedades de átomos y moléculas individuales.  
 Efectuar el tratamiento matemático de datos procedentes de procesos químicos y gestión de calidad de los laboratorios.  
 Evaluación, interpretación y síntesis de datos e información química. Obtención, procesamiento y tratamiento, mediante técnicas computacionales, de datos químicos.  
 Conocimiento de una lengua extranjera (preferentemente inglés).  
 Utilización de las tecnologías de la información y la comunicación (TIC's) más adecuadas en cada situación.  
 Capacidad de relación de la Química con otras disciplinas.  
 Capacidad de:  
 a) Utilización correcta del método de inducción y generación de nuevas ideas.  
 b) Análisis y síntesis.  
 c) Organización y planificación.  
 d) Trabajo en un contexto internacional.

- e) Expresión tanto oral como escrita.
  - f) Razonamiento crítico. Resolución de problemas.
  - g) Toma de decisiones.
  - h) Trabajo en equipo (también de carácter interdisciplinar) y liderazgo para dirigir y ejecutar las tareas del laboratorio químico y en instalaciones industriales complejas.
- Capacidad de comunicar de una forma clara y precisa conocimientos y conclusiones a un público tanto especializado como no especializado.
- Capacidad para aprender nuevas técnicas y conocimientos que permitan emprender estudios posteriores con un alto grado de autonomía.
- Desarrollo de habilidades de aprendizaje personal. Adquisición de habilidades en las relaciones interpersonales, liderazgo, creatividad y adaptación a nuevas situaciones.

#### **METODOLOGÍA DEL TRABAJO**

- \* Revisión de bibliografía disponible sobre el tema del trabajo: las superficies de energía potencial o superficies de Born-Oppenheimer, en concreto, aquellas que describen la reactividad entre especies químicas elementales.
- \* Utilizando software específico, emplear superficies de energía potencial para la determinación de propiedades de sustancias estables, así como de intermedios reactivos para moléculas sencillas.
- \* Determinar propiedades cinéticas y dinámicas de reacciones químicas elementales a partir del análisis del movimiento de partículas sobre superficies de energía potencial.

#### **BIBLIOGRAFÍA**

- \* "Superficies de energía potencial y reactividad química." Joaquín Espinosa García, Septem Ediciones, 2001.
- \* "Chemical kinetics and reaction dynamics." Paul L. Houston, McGraw-Hill, 2001.

Titulación: GRADO EN QUÍMICA

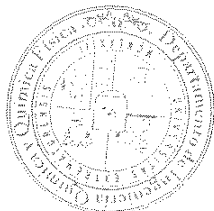
Observaciones:

#### **-TUTORES:**

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

Área de conocimiento: Química Física

Fecha de aprobación del Consejo del Departamento: 29/10/2018



Vº Bº y Firma del Director del Dpto

Vº Bº y Firma del Tutor

Decanato de la Facultad de Ciencias

ANEXO I  
 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			
Proyectos de Ingeniería	Proyectos de diseño Industrial			
Computacional	Experimental	X		
		X	Otros (especificar)	

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

El trabajo consistirá en la medición experimental del desplazamiento que se produce en la longitud de onda de máxima adsorción del espectro UV de una sustancia coloreada al modificar el disolvente en que se realiza la medida del espectro. Posteriormente, se intentará reproducir dicho desplazamiento mediante técnicas de simulación por ordenador basadas en métodos de la mecánica cuántica.

Los objetivos principales del trabajo serán familiarizar al alumno con los programas más habituales de la química teórica, con técnicas de cálculo de estructura electrónica y promover la capacidad de interpretación de datos experimentales desde una perspectiva teórica.

Titulación: Grado en Química

Observaciones:

**-TUTORES:**

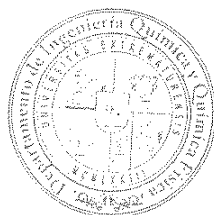
Nombre: José Carlos Corchado Martín-Romo, María Luz Sánchez Mendoza, Jorge Antonio

Sansón Martín y M<sup>a</sup> Elena Martín Navarro

Área de conocimiento: Química Física

Fecha de aprobación del Consejo del Departamento: 29/10/2018

**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:**

**Modelación de un reactor biológico y decantador mediante el paquete ANACONDA.**

**- 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	<input checked="" type="checkbox"/> Experimental
Trabajos de investigación o de investigación y desarrollo (Tipo C)	Otros (especificar)		

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

El trabajo propuesto tratará de implementar el ASM2 promulgado por IWA en conjunción con un sedimentador secundario, todo ello en lenguaje de programación PYTHON utilizando la distribución ANACONDA. Constará de una parte dedicada a la simulación y otra parte dedicada al diseño de la interfaz gráfica para interactuar con el proceso.

Titulación: **Grado en Química**

Observaciones: **Se recomienda que el alumno tenga conocimientos previos tanto de los modelos relativos a la depuración biológica promulgados por el IWA así como de programación en el lenguaje PYTHON.**

**-TUTOR/ES\*:**

Nombre: Enrique Martínez de Salazar Martínez

Área de conocimiento: Proyectos de Ingeniería.

**Fecha de aprobación del Consejo del Departamento:** 29 de octubre de 2018

**Vº Bº y Firma del Director del Dpto**  
**Francisco Jesús Moral García**



**Vº Bº y Firma del Tutor/es**  
**Enrique Martínez de Salazar Martínez**

A handwritten signature in black ink, appearing to read "Enrique", written over a large, loopy scribble.

*\* 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:**

Eliminación de colorantes de medio acuoso mediante fotocatalisis.

**- CARACTERÍSTICAS DEL TRABAJO FIN DE GRADO**

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

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

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

Uno de los grupos de contaminantes más habituales en el mundo son los colorantes, que se producen sobre todo como residuo de la industria textil. Además de la toxicidad intrínseca para los seres vivos, presentan un efecto especialmente dañino en las aguas superficiales, ya que impiden el paso de luz y con ello el crecimiento de plantas acuáticas que son el inicio de la cadena alimenticia.

En este trabajo se emplearán distintos fotocatalizadores de óxido de titanio(IV), que al ser irradiados con luz UV oxidan a los colorantes hasta su eliminación. Se realizarán ensayos en distintas condiciones experimentales y los resultados se evaluarán mediante espectroscopia UV-Vis.

Titulación: Química

SECRETARÍA DE TRABAJO Y PREVISIÓN SOCIAL  
SECRETARÍA DE ECONOMÍA

P  
1  
1

RESPONSABLE DE LA SECRETARÍA

DEPARTAMENTO DE LA

TÍTULO DEL TRABAJO:



Observaciones:

**-TUTOR/ES\*:**


Nombre: Carlos Javier Durán Valle

Área de conocimiento: Química Inorgánica

**Fecha de aprobación del Consejo del Departamento: 30-10-2018**

  
Ignacio López-Coca Martín  
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**

UNIVERSIDAD DE EXTREMADURA

Rellenar a ordenador

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:**

Análisis mediante espectroscopia fotoelectrónica de rayos X (XPS) de materiales carbonosos

**- 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 espectroscopia fotoelectrónica de rayos X es una de las herramientas más poderosas para el estudio de la superficie química de los sólidos. No obstante, la determinación de estructuras por esta técnica es en ocasiones incierta, y más aún cuando se trata de sólidos sin composición definida como suelen ser los materiales carbonosos.

En este trabajo se emplearán métodos de cálculo DFT para determinar el valor de la energía de enlace en átomos de determinados grupos funcionales. Así se podrá realizar una asignación de las distintas señales experimentales a los grupos funcionales presentes en la superficie de los materiales basados en el carbón.

Titulación: Química


Observaciones:

**-TUTOR/ES\*:**

Nombre: Carlos Javier Durán Valle

Área de conocimiento: Química Inorgánica

**Fecha de aprobación del Consejo del Departamento: 30-10-2018**



Ignacio López-Coca Martín

**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 disolventes eutécticos naturales profundos (NADES) 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 utilización NADES 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: Este trabajo, si se desea, podrá desarrollarse en los laboratorios del departamento en el Campus de Cáceres.


**-TUTOR/ES\*:**

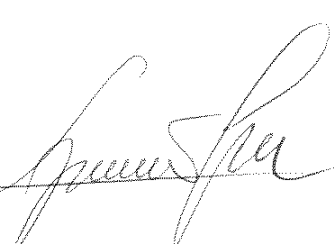
Nombre: Ignacio López-Coca Martín

Área de conocimiento: Química Orgánica

**Fecha de aprobación del Consejo del Departamento: 30-10-2018**

  
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:  
QUÍMICA ORGÁNICA E INORGÁNICA**

**-TÍTULO DEL TRABAJO:**

Síntesis y caracterización de compuestos de coordinación con ligandos que contienen heterociclos S,N e iones metálicos.

**- 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...)

Los objetivos del trabajo son:

- Síntesis de los ligandos orgánicos que contienen heterociclos S,N.
- Síntesis de compuestos de coordinación con el ligando que contiene heterociclos S,N e iones metálicos.
- Caracterización de los compuestos de coordinación obtenidos utilizando diversas técnicas como pueden ser el análisis elemental, la espectroscopia electrónica, espectroscopia IR y difracción de rayos X de monocristal.

Titulación: Grado en Química


Observaciones:

**-TUTOR/ES\*:**

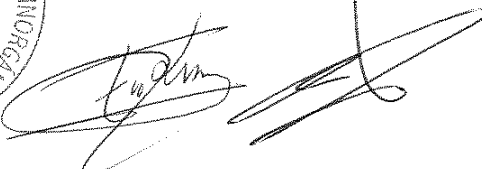
Nombre: Francisco Luna Giles  
Emilio Viñuelas Zahinos

Área de conocimiento: Química Inorgánica

Fecha de aprobación del Consejo del Departamento: 30/10/2018

  
Ignacio López-Coca Martín





**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**



UNIVERSIDAD DE EXTREMADURA

Rellenar a ordenador

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:

Empleo de fitoquímicos del té verde (*Camellia sinensis*) como aditivos alimentarios naturales

- 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 principal de este trabajo es la aplicación de un extracto obtenido a partir de del té verde (*Camellia sinensis*) en un modelo *in vivo* (mayonesa) como aditivo alimentario para prolongar su vida útil.

Como objetivos específicos se pretende:

- 1) Caracterizar los componentes fitoquímicos del extracto de té verde.
- 2) Evaluar la dosis para el empleo como aditivo alimentario del extracto de té verde que permita una extensión de la vida útil del producto.
- 3) Emplear diferentes fitoquímicos del extracto de té verde evaluando su actividad como antioxidante y como agente que aumente la seguridad microbiológica.



Titulación: Grado de QUÍMICA

Observaciones:

**-TUTOR/ES\*:**

Nombre: María Victoria Gil Álvarez

Nombre: Javier Rocha Pimienta

Área de conocimiento: Química Orgánica

Entidad Externa: CICYTEX

**Fecha de aprobación del Consejo del Departamento: 30-10-2018**

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

**Vº Bº y Firma del Tutor/es**



Ignacio López-Coca



*\* 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

Rellenar a ordenador

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:**

Biodisponibilidad de compuestos fenólicos en aceitunas de mesa tratadas por altas presiones hidrostáticas y determinación del contenido en acrilamida

**- 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 de este trabajo es estudiar la evolución de los compuestos fenólicos en aceitunas de mesa elaboradas al estilo español. La digestibilidad in vitro (muestras sometidas a la acción de los jugos gástricos) y la disponibilidad de los compuestos fenólicos será evaluada. Con el propósito de alcanzar una correcta conservación de las aceitunas de mesa elaboradas, estas serán sometidas a un tratamiento de Altas Presiones Hidrostáticas (HHP). Además se completará el estudio mediante la evaluación del contenido en acrilamida en aceitunas de la variedad incluida en la *Denominación de Origen Protegida "Oliva Ascolana del Piceno"* (Región de la Marche, Italia) tras el proceso de fritura. Este tipo de aceituna es elaborada con receta tradicional en esta región italiana.

R

Para el desarrollo de estos objetivos se tratarán las siguientes metodologías:

- elaboración aceitunas de mesa a escala piloto.
- extracción de los compuestos fenólicos para la determinación analítica de su perfil.
- manejo de equipos emergentes como es el equipo de Altas Presiones Hidrostáticas.
- realización de digestiones in vitro en laboratorio.
- manejo de equipos instrumentales para la determinación de los compuestos fenólicos y la acrilamida.
- manejo de técnicas microbiológicas.
- tratamiento de datos y paquete estadístico.

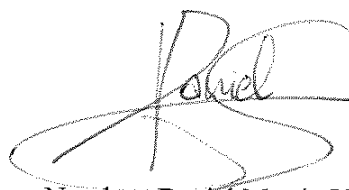
Titulación: Grado de QUÍMICA

Observaciones:

-TUTOR/ES\*:

Nombre: M<sup>o</sup> Victoria Gil Álvarez

Área de conocimiento: Química Orgánica



Nombre: Daniel Martín Vertedor

Centro: CICYTEX

Fecha de aprobación del Consejo del Departamento: 30-10-2018

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



Ignacio López-Ceas Martín

V<sup>o</sup> B<sup>o</sup> 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



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:**

**Revisión de los métodos de análisis de residuos de pesticidas en vinos.**

**- CARACTERÍSTICAS DEL TRABAJO FIN DE GRADO**

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

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

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

Se realizará una revisión bibliográfica sobre los métodos de análisis de residuos de pesticidas en los vinos.

Es muy importante que los residuos de pesticidas en vinos, en caso de que haya, estén en cantidades por debajo de los límites máximos establecidos, para que la salud humana no se vea afectada. Por ello es necesario contar con métodos de análisis suficientemente sensibles y selectivos. Además, con la introducción del uso de nuevos pesticidas, el desarrollo de nuevos métodos de análisis es muy importante.

Se manejará el material bibliográfico del que dispone el Departamento de Química Analítica a través del Servicio de Biblioteca de la Universidad de Extremadura. En primer lugar será necesario aprender a realizar una búsqueda bibliográfica, y a continuación se tratará de manejar correctamente las referencias encontradas, se seleccionarán los trabajos más interesantes y se sintetizarán.

Titulación: **Grado en Química**

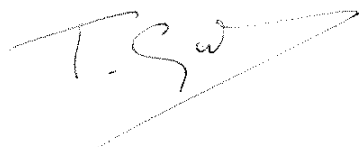
Observaciones:

**-TUTOR/ES\*:**

Nombre: **NIELENE MORA DÍEZ, M<sup>a</sup> ISABEL RODRÍGUEZ CÁCERES y M<sup>a</sup> ISABEL ACEDO VALENZUELA**

Área de conocimiento: **QUÍMICA ANALÍTICA**

Fecha de aprobación del Consejo del Departamento: **30/10/2018**



**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**



UNIVERSIDAD DE EXTREMADURA

FACULTAD DE CIENCIAS

## ANEXO 1 PROPUESTA DE TRABAJO FIN DE GRADO

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

**-ENTIDAD EXTERNA:** Departamento de DIDÁCTICA DE LAS CIENCIAS, de la Universidad de Jaén

**-TÍTULO DEL TRABAJO:** Evaluación Automática de Resultados Numéricos y Experimentales en Química Analítica en la Plataforma de e-Learning DOCTUS

### - 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...)

#### **Objetivos:**

El trabajo de fin de grado propuesto es un proyecto conjunto en colaboración con el Departamento de Didáctica de las Ciencias de la Universidad de Jaén. En el mismo, se utilizará la plataforma de e-learning DOCTUS para programar distintas unidades de evaluación de resultados numéricos y experimentales en Química Analítica. Dicha programación se desarrollará en entornos MatLab y Excel. Se aplicará a resultados analíticos obtenidos en ejercicios de comparación entre laboratorios analíticos (ejercicios de intercomparación), relacionados con temas abordados en la asignatura optativa *Control de Calidad en los Laboratorios Analíticos* impartida en 4º curso del Grado de Química (1-11). El objetivo principal del proyecto está relacionado con algunas competencias profesionales y transversales que debería adquirir el estudiante tras completar el periodo formativo. Entre ellas destacaríamos que el alumno posea destrezas en el uso de las nuevas tecnologías, así como

identificar, resolver y prevenir problemas en su área profesional.

Entre las **competencias profesionales** podríamos destacar:

C17: Reconocimiento y análisis de nuevos problemas y planificación de estrategias para su solución tanto en un entorno académico como profesional.

C19: Evaluación, interpretación y síntesis de datos.

C21: Interpretación de datos derivados de observaciones y medidas en el laboratorio.

C24: Utilización de las tecnologías de la información y la comunicación (TICs) más adecuadas en cada situación.

### **Metodología**

Se utilizará el servidor de e-learning DOCTUS para analizar los resultados analíticos obtenidos en ejercicios de comparación entre laboratorios. Dicho servidor se encuentra ubicado en la Escuela de Ingenierías Industriales de la Universidad de Sevilla, teniendo acceso al mismo a través de la dirección: <http://doctus.us.es/sdocencia/public/index.php>

El material a elaborar es un programa informático, en los entornos MatLab y Excel, ejecutable como evaluador y generador aleatorio de problemas individuales, en DOCTUS. Precisamente son éstas las características nuevas que posee esta plataforma respecto a la anterior, Goodle GMS: Posibilidad de generar problemas aleatorios y posibilidad de programar en Excel, que facilita la utilización del sistema.

Se calculará para cada laboratorio el valor de z-score, así como los tests de rechazo de resultados sospechosos (posibles anómalos) de Cochran y de Grubbs, simple y doble, implementados en la plataforma DOCTUS como programa evaluador de dichos resultados, así como otros parámetros de utilidad en el control de calidad de los laboratorios de análisis.

### **Bibliografía**

- (1) Gómez-Estern, F.; López-Martínez, M.; Muñoz de la Peña, D., Sistema de Evaluación Automática vía Web en Asignaturas Prácticas de Ingeniería, *Revista Iberoamericana de Automática e Informática Industrial*, **2010**, 3, 111-119.
- (2) Muñoz de la Peña, D.; Gómez-Estern, F.; Dormido, S., A new Internet tool for automatic evaluation in control systems and programming, *Computers and Education*, **2012**, 59, 535-550.
- (3) Muñoz de la Peña, A.; Muñoz de la Peña, D.; Evaluación automática de ejercicios y prácticas de laboratorio de análisis instrumental, *Actualidad Analítica, Boletín de la Sociedad Española de Química Analítica*, **2012**, 38, 12-13.
- (4) Muñoz de la Peña, A.; González-Gómez, D.; Muñoz de la Peña, D.; Gómez-Estern, F., Sánchez Sequedo, M., Automatic Web-Based Grading System: Application in an Advanced Instrumental Analysis Chemistry Laboratory, *Journal of Chemical Education*, **2013**, 90, 308-314.
- (5) Rodríguez Cáceres, M.I., Mora Díez, N., Godoy Caballero, M.P., Muñoz de la Peña, D., González Gómez, D., Muñoz de la Peña, A., An Automatic Grading system for a Laboratory Experiment Class: Kinetic Determination of Furfural as a Parameter of Food Quality, *Chemical Educator*, **2014**, 14, 148-52.
- (6) Muñoz de la Peña, A.; Muñoz de la Peña, D.; Godoy Caballero, M.P., González-Gómez, D.; Gómez-Estern, F., Sánchez, C., Automatic Automation and Data Generation for Analytical Chemistry Instrumental Analysis Exercises, *Química Nova*, **2014**, 37, 1550-1558.
- (7) Muñoz de la Peña, A.; Muñoz de la Peña, D.; Hurtado-Sánchez, M.C.; Godoy-Caballero, M.P.; Espinosa-Mansilla, A.; Durán-Merás, I., Evaluación Automática de Competencias en un

Ejercicio de Intercomparación mediante ANOVA, *Actualidad Analítica, Boletín de la Sociedad Española de Química Analítica*, **2015**, 51, 1550-1558.

- (8) Godoy Caballero, M.P.; Hurtado Sánchez, M.C.; Durán Merás, I., Muñoz de la Peña, D.; Muñoz de la Peña, Teaching ANOVA in a laboratory class: Emulating an inter-laboratory exercise using a simple liquid chromatographic practice, *Chemical Educator*, **2017**, 22, 55-59.
- (9) Pinilla-Gil, E., García de Tiedra, M.P., Muñoz de la Peña, A., Muñoz de la Peña, D., Evaluación mediante DOCTUS-EXCEL de una práctica de laboratorio: determinación potenciométrica de fluoruro en vinos, *Actualidad Analítica, Boletín de la Sociedad Española de Química Analítica*, **2017**, 32, 32-34.
- (10) Sánchez Sequedo, Manuel, Determinación de nitritos en aguas naturales mediante análisis por inyección en flujo. Sistema automático de evaluación de trabajos experimentales en análisis químico instrumental, memoria de Trabajo de Fin de Grado, Facultad de Ciencias, Universidad de Extremadura, 2013.
- (11) Godoy Caballero, María del Pilar, Generación y evaluación automática de datos numéricos y experimentales de análisis químico instrumental, Facultad de Ciencias, Universidad de Extremadura, 2016.

#### **Titulación: Química**

**Observaciones:** Recomendable haber cursado la asignatura Optativa Control de Calidad en los Laboratorios Analíticos.

Se solicita la inclusión como tutor de un profesor del Departamento Didáctica de las Ciencias, área de conocimiento de Didáctica de las Ciencias Experimentales de la Universidad de Jaén, ya que se trata de un proyecto en colaboración con dicho Departamento.

#### **-TUTORES:**

Nombre: Arsenio Muñoz de la Peña Castrillo

Área de conocimiento: Química Analítica

Nombre: Diego Airado Rodríguez


Área de Conocimiento: Didáctica de las Ciencias Experimentales (Universidad de Jaén)

**Fecha de aprobación del Consejo del Departamento:**

30/10/2018

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

**Vº Bº y Firma de los Tutores**







**Arsenio Muñoz de la Peña Castrillo**



**Diego Airado Rodríguez**

**Decanato de la Facultad de Ciencias**



UNIVERSIDAD DE EXTREMADURA

Rellenar a ordenador

FACULTAD DE CIENCIAS

## ANEXO 1 PROPUESTA DE TRABAJO FIN DE GRADO

-DEPARTAMENTO DE LA UEX RESPONSABLE DE LA OFERTA:

-TÍTULO DEL TRABAJO: Evaluación de antioxidantes en pasta de tomate mediante técnicas electroanalíticas

- CARACTERÍSTICAS DEL TRABAJO FIN DE GRADO

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

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

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

El creciente interés en los alimentos funcionales ha llevado al uso de técnicas analíticas para cuantificar algunas de sus propiedades, entre las que se encuentra la capacidad antioxidante (AC). Para identificar y cuantificar esta capacidad se utilizan algunas reacciones, basadas en la captura de radicales sintéticos, y con un seguimiento mediante espectrofotometría UV-Vis. Las técnicas electroquímicas están surgiendo como alternativas, dadas algunas de las desventajas a las que se enfrentan los métodos espectrofotométricos, como el uso de reactivos caros no respetuosos con el medio ambiente, tiempo de reacción indefinido, pretratamiento prolongado de la muestra y baja precisión y sensibilidad. Esta propuesta de trabajo fin de grado se centra en llevar a cabo una revisión bibliográfica sobre la utilización de las distintas técnicas electroanalíticas más utilizadas

(voltamperometría cíclica, voltamperometría diferencial de pulso y voltamperometría de onda cuadrada) para la evaluación de la presencia de antioxidantes en alimentos, y en concreto en pasta de tomate. Los métodos electroanalíticos son sencillos caracterizándose por su sensibilidad y selectividad, a la vez que proporcionan una respuesta rápida. Son técnicas de bajo coste, siendo una de sus principales ventajas la posibilidad de análisis directo de la muestra sin pasos tediosos de preparación y separación posterior. Esta revisión es el primer paso imprescindible que debe afrontar cualquier investigador ya que cualquier nueva propuesta debe partir de un buen conocimiento del "state of the art" de la problemática a tratar. Posteriormente se intentará proponer alguna alternativa a los métodos descritos que suponga una mejora respecto a los mismos, haciendo uso de diferentes tipos de electrodos, convencionales o serigrafiados (screen-printed).

Se pretende completar la formación del alumno en lo referente a la forma de realizar búsquedas bibliográficas, extraer la información relevante y sistematizarla, así como iniciarlo en las tareas de investigación, desarrollando su iniciativa, autocrítica y capacidad de análisis del trabajo realizado.

Para llevar a cabo estos objetivos propuestos se seguirá la siguiente metodología:

- Revisión bibliográfica sobre la utilización de diferentes técnicas electroanalíticas para la determinación de diferentes compuestos en tomate, así como los distintos métodos de pretratamiento de muestras previos a la medida.
- Optimización de un método para la determinación del conjunto de principales antioxidantes presentes en el tomate, mediante la utilización de diferentes tipos de electrodos, entre ellos los impresos de carbono (SPE) modificados o no, y utilizando diferentes técnicas como las mencionadas al comienzo. Para ello se abordará el estudio de la influencia de las variables químicas e instrumentales y se establecerán los rangos de linealidad, utilizando alguno de los principales antioxidantes como patrón interno.
- Validación del método propuesto, mediante la comparación de resultados con los obtenidos mediante métodos espectrofotométricos
- Correlación de resultados con la procedencia de las muestras (variedad de tomate, maduración, etc.)

Titulación: Grado en Química

Observaciones:

**-TUTOR/ES\*:**

Nombre: **Teresa Galeano Díaz**

Área de conocimiento: Química Analítica

Nombre: Agustina Guiberteau Cabanillas


Área de conocimiento: Química Analítica

Nombre: Rosario Pardo Botello (PCI contratado en el Departamento de Química Analítica)

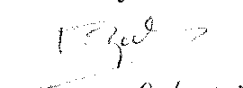
Área de conocimiento: Química Analítica

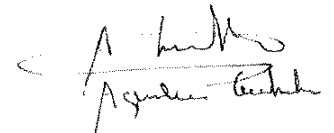
Fecha de aprobación del Consejo del Departamento: 30/10/2018

V° B° y Firma del Director del Dpto

  
Teresa Guiberteau

V° B° y Firma del Tutor/es

  
Teresa Guiberteau

  
Rosario Pardo

Rosario Pardo

*\* 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 QUÍMICA

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

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

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

**- CARACTERÍSTICAS DEL TRABAJO FIN DE GRADO**

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

<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>	<b>Experimental</b>	<b>X Otros (especificar)</b>	<b>x</b>

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

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

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

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

Los objetivos que se plantean son los siguiente:

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

métodos electroanalíticos y técnicas quimiométricas.

La metodología a seguir se esquematiza en los siguientes puntos:

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

**-TUTORES:**

Nombre: Agustina Guiberteau Cabanillas

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

Nombre: Isabel Durán Martín Merás

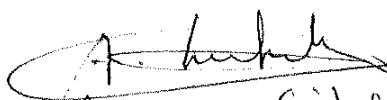
Área de conocimiento: Química Analítica. Facultad de Ciencias. Universidad de Extremadura

Nombre: Rosario Pardo Botello (Personal Contratado Investigador)

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

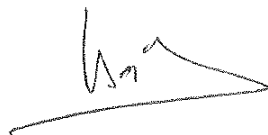
Fecha de aprobación del Consejo del Departamento: 30/10/2018

Vº Bº y Firma del Tutor

  
Agustina Guiberteau  
Cabanillas

Vº Bº y Firma del Director del Dpto Química Analítica

Vº Bº y Firma del Tutor



Vº Bº y Firma del Tutor





**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:**

ESTUDIOS PRELIMINARES SOBRE LA DETERMINACIÓN DE PESTICIDAS DE LA FAMILIA DE LOS NEONICOTINOIDES EN MIELES MEDIANTE CROMATOGRAFÍA LÍQUIDA.

**- CARACTERÍSTICAS DEL TRABAJO FIN DE GRADO**

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

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

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

El principal objetivo de este trabajo es poner en práctica los conocimientos adquiridos en las asignaturas obligatorias de 3º Curso del Grado de Química Técnicas Analíticas de Separación e Hibridación Instrumental y Análisis Instrumental.

Inicialmente se llevará a cabo una revisión bibliográfica sobre los antecedentes bibliográficos acerca de la determinación de pesticidas de la familia de los neonicotinoides en general y su aplicación a mieles en particular. 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 un método cromatográfico sencillo y se elegirá el método de detección más adecuado. Está recogido en la bibliografía que algunos de estos compuestos muestran fluorescencia tras ser irradiados con luz UV. Por otro lado, estos compuestos absorben en el UV. Por ello se estudiarán las ventajas e inconvenientes de emplear uno u otro sistema de detección.

Por otro lado, dada la peligrosidad del uso de estos pesticidas para la supervivencia de las abejas, se ha prohibido su uso en el cultivo de vegetales de flores que las abejas pueden visitar y libar. No obstante, es posible encontrarlos como residuos en mieles. En este caso, es necesario un tratamiento previo de la muestra dada la complejidad de la matriz. Se estudiarán diferentes tratamientos como el clásico de extracción líquido-líquido o más actuales como la microextracción dispersiva.

Titulación: Grado en Química

Observaciones: Haber superado las asignaturas de Química Analítica.

**-TUTOR/ES\*:**

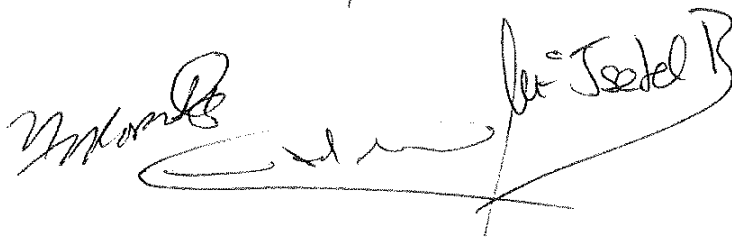
Nombre: **NIELENE MORA DÍEZ, M<sup>a</sup> ISABEL ACEDO VALENZUELA, M<sup>a</sup> ISABEL RODRÍGUEZ CÁCERES.**

Área de conocimiento: QUÍMICA ANALÍTICA

Fecha de aprobación del Consejo del Departamento: 30/10/2018



**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**