
	PROCEDIMIENTO DE GESTIÓN DE LOS TRABAJOS FIN DE TITULACIÓN DE LA FACULTAD DE CIENCIAS DE LA UEX (PR/CL002_FC)	 Facultad de Ciencias
	Asunto: Anexo I PROPUESTA DE TRABAJO FIN DE GRADO	

ANEXO I PROPUESTA DE TRABAJO FIN DE GRADO

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

CARACTERÍSTICAS DEL TRABAJO							
TÍTULO	CAMINANDO SOBRE SUPERFICIES DE ENERGÍA POTENCIAL						
TIPO DE TRABAJO (señalar con una cruz el que proceda)							
Teórico	Revisión bibliográfica	X	Númérico		Informes	Computacional	X
Experimental	Proyectos de diseño industrial (tipo A)		Estudios e informes técnicos (tipo B)		Trabajos de investigación o de investigación y desarrollo (tipo C)		
Otros (especificuese)							
DESCRIPCIÓN (Objetivos, metodología, etc...)							
<p>OBJETIVOS</p> <ul style="list-style-type: none"> * Llevar a cabo una revisión crítica de la literatura científica reciente sobre la determinación de superficies de energía potencial * Determinar propiedades cinéticas y dinámicas de reacciones químicas elementales a partir del análisis del movimiento de partículas sobre superficies de energía potencial. <p>METODOLOGÍA DEL TRABAJO</p> <ul style="list-style-type: none"> * 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. <p>BIBLIOGRAFÍA</p> <ul style="list-style-type: none"> * "Superficies de energía potencial y reactividad química." Joaquín Espinosa García, Septem Ediciones, 2001. * "Chemical kinetics and reaction dynamics." Paul L. Houston, McGraw-Hill, 2001. 							
OBSERVACIONES							

DATOS DEL DIRECTOR/A O DIRECTORES (*)	
APELLIDOS, NOMBRE	Espinosa García, Joaquín
Área de conocimiento	Química Física
APELLIDOS, NOMBRE	Corchado Martín-Romo, Jose Carlos
Área de conocimiento	Química Física

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

Fecha de aprobación del Consejo del Departamento: 3/11/2022




Vº Bº y Firma del Director del Dpto



Firmado digitalmente por
CORCHADO
MARTIN-ROMO
JOSE CARLOS -

ESPINOSA
GARCIA

Firmado digitalmente por
ESPINOSA
GARCIA JOAQUIN

Firma del Director/es

Vº Bº y Firma de la Entidad Externa

DECANATO DE LA FACULTAD DE CIENCIAS

(Enviar por correo electrónico a secretaria_cien@unex.es)

	PROCEDIMIENTO DE GESTIÓN DE LOS TRABAJOS FIN DE TITULACIÓN DE LA FACULTAD DE CIENCIAS DE LA UEX (PR/CL002_FC)	
	Asunto: Anexo I PROPUESTA DE TRABAJO FIN DE GRADO	

ANEXO I PROPUESTA DE TRABAJO FIN DE GRADO

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

CARACTERÍSTICAS DEL TRABAJO					
TÍTULO	ESTUDIO TEÓRICO DEL EQUILIBRIO CONFORMACIONAL EN PEQUEÑOS DIPÉPTIDOS				
TIPO DE TRABAJO (señalar con una cruz el que proceda)					
Teórico	Revisión bibliográfica	Númérico	Informes	Computacional	
Experimental	Proyectos de diseño industrial (tipo A)	Estudios e informes técnicos (tipo B)	Trabajos de investigación o de investigación y desarrollo (tipo C)		X
Otros (especificuese)					
DESCRIPCIÓN (Objetivos, metodología, etc...)					
<p>El presente trabajo de fin de Grado trabajo se orienta al estudio teórico de la influencia que el disolvente ejerce sobre el equilibrio conformacional de un dipéptido. Estos pequeños péptidos sirven como modelos donde estudiar la influencia que los grupos laterales y el disolvente tienen sobre sistemas mayores como pueden ser las proteínas y sirven de ayuda a la hora de resolver uno de los problemas fundamentales de la química computacional como es el plegamiento de proteínas.</p> <p>En el estudio se emplearán métodos mecano-cuánticos (MP2, DFT) en la descripción del dipéptido y técnicas de dinámica molecular en la descripción del disolvente. Ambos se combinarán haciendo uso de un método desarrollado por nuestro grupo de investigación y conocido como ASEP/MD, el cual hace uso de una aproximación de campo medio en la descripción de la perturbación generada por el disolvente sobre el volumen ocupado por el soluto.</p>					
OBSERVACIONES					

DATOS DEL DIRECTORÍA O DIRECTORES (*)	
APELLIDOS, NOMBRE	Aguilar Espinosa, Manuel Ángel
Departamento / Área de conocimiento	Ingeniería Química y Química Física / Química Física
APELLIDOS, NOMBRE	Martín Navarro, María Elena
Departamento / Área de conocimiento	Ingeniería Química y Química Física / Química Física

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

Fecha de aprobación del Consejo del Departamento:

3/11/2022




AGUILAR
ESPINOSA
MANUEL
ANGEL -

Firmado digitalmente por
AGUILAR
ESPINOSA
MANUEL ANGEL -

MARTIN
NAVARRO
MARIA
ELENA -

Firmado digitalmente por
MARTIN NAVARRO MARIA



Vº Bº y Firma del Director del Dpto

Firma del 1 . _____

Vº Bº y Firma de la Entidad Externa

DECANATO DE LA FACULTAD DE CIENCIAS

(Enviar por correo electrónico a secretaria_cien@unex.es)

	PROCEDIMIENTO DE GESTIÓN DE LOS TRABAJOS FIN DE TITULACIÓN DE LA FACULTAD DE CIENCIAS DE LA UEX (PR/CL002_FC)	
	Asunto: Anexo I PROPUESTA DE TRABAJO FIN DE GRADO	

ANEXO I PROPUESTA DE TRABAJO FIN DE GRADO

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

CARACTERÍSTICAS DEL TRABAJO										
TÍTULO	DESARROLLO DE SOFTWARE CIENTÍFICO PARA EL CÁLCULO DE ENERGÍAS LIBRES EN DISOLUCIÓN									
TIPO DE TRABAJO (señalar con una cruz el que proceda)										
Teórico	<input checked="" type="checkbox"/>	Revisión bibliográfica		Númérico		Informes		Computacional		<input checked="" type="checkbox"/>
Experimental		Proyectos de diseño industrial (tipo A)		Estudios e informes técnicos (tipo B)		Trabajos de investigación o de investigación y desarrollo (tipo C)				
Otros (especifíquese)										
DESCRIPCIÓN (Objetivos, metodología, etc...)										
<p>La energía libre es una magnitud fundamental en el estudio de los procesos en disolución, pues es la que determina el sentido de la evolución de los mismos. Se han propuesto distintos métodos para su cálculo, entre los que destacan "umbrella sampling", "free energy perturbation methods", e "integración termodinámica"</p> <p>El presente trabajo tiene como objetivo fundamental la elaboración de un programa informático que permita el cálculo de energías libres mediante integración termodinámica. Dicho programa se emplearía para el estudio de propiedades termodinámicas de sistemas en disolución utilizando la metodología ASEP/MD, más concretamente se calculará la estabilidad relativa de los diferentes conformeros de pequeños péptidos que sirven como modelo del plegamiento en proteínas.</p>										
OBSERVACIONES										
<p>Durante la realización del trabajo se hará uso de un entorno Linux. Es necesario tener conocimientos básicos de programación en Fortran o C.</p>										

DATOS DEL TUTOR O TUTORES (*)	
APELLIDOS, NOMBRE	Agullar Espinosa, Manuel Ángel
Departamento / Área de conocimiento	Ingeniería Química y Química Física / Química Física
APELLIDOS, NOMBRE	Corchado Martín-Romo, José Carlos
Departamento / Área de conocimiento	Ingeniería Química y Química Física / Química Física

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

Fecha de aprobación del Consejo del Departamento:

3/11/2022




AGUILAR
ESPINOSA
MANUEL

Firmado digitalmente por
AGUILAR
ESPINOSA
MANUEL ANGEL -



Firmado digitalmente por
CORCHADO
MARTIN-ROMO
JOSE CARLOS -



Vº Bº y Firma del Director del Dpto

Firma del Director/es

Vº Bº y Firma de la Entidad Externa

DECANATO DE LA FACULTAD DE CIENCIAS

(Enviar por correo electrónico a secretaria_cien@unex.es)

	PROCEDIMIENTO DE GESTIÓN DE LOS TRABAJOS FIN DE TITULACIÓN DE LA FACULTAD DE CIENCIAS DE LA UEX (PR/CL002_FC)	 Facultad de Ciencias
	Asunto: Anexo I PROPUESTA DE TRABAJO FIN DE GRADO	



ANEXO I PROPUESTA DE TRABAJO FIN DE GRADO

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

-GRADO: QUÍMICA

CARACTERÍSTICAS DEL TRABAJO							
TÍTULO	Búsqueda bibliográfica de sideróforos						
TIPO DE TRABAJO (señalar con una cruz el que proceda)							
Teórico	Revisión bibliográfica	X	Númerico	Informes	Computacional		
Experimental	Proyectos de diseño industrial (tipo A)		Estudios e informes técnicos (tipo B)	Trabajos de investigación o de investigación y desarrollo (tipo C)			
Otros (especifíquese)							
DESCRIPCIÓN (Objetivos, metodología, etc...)							
<p>Estos ligandos se sintetizan por parte de los microorganismos como respuesta a bajos niveles de Fe y son segregados para que desempeñen su función. Unen y solubilizan Fe(III) de alto spin formando complejo de coordinación aproximadamente octaédrico que vuelven a entrar en la célula por los lugares específicos que hay en su superficie. Se encargan de proporcionar Fe para el transporte, almacenamiento o incorporación en proteínas y actúan por procesos de reducción/protonación, por ejemplo en las membranas de los receptores.</p>							
OBSERVACIONES							
<p>Este trabajo bibliográfico está orientado a alumnos/as del grado en Química con conocimientos tanto de Química de Coordinación como de Bioinorgánica.</p>							
DATOS DEL TUTOR O TUTORES (*)							
APELLIDOS, NOMBRE	Barros García, Fernando José						
Área de conocimiento	Química Inorgánica						
APELLIDOS, NOMBRE							
Área de conocimiento							

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

	PROCEDIMIENTO DE GESTIÓN DE LOS TRABAJOS FIN DE ESTUDIOS DE LA FACULTAD DE CIENCIAS DE LA UEX (PR/CL002_FC)	
	Asunto: Anexo I PROPUESTA DE TRABAJO FIN DE GRADO	

ANEXO I PROPUESTA DE TRABAJO FIN DE GRADO

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

-GRADO: Química

CARACTERÍSTICAS DEL TRABAJO							
TÍTULO	Estudio mediante la Base de datos cristalográfica de Cambridge de parámetros estructurales de compuestos de coordinación.						
TIPO DE TRABAJO (señalar con una cruz el que proceda)							
Teórico	Revisión bibliográfica	X	N Numérico		Informes		Computacional
Experimental	Proyectos de diseño industrial (tipo A)		Estudios e informes técnicos (tipo B)		Trabajos de investigación o de investigación y desarrollo (tipo C)		
Otros (especificarse)							
DESCRIPCIÓN (Objetivos, metodología, etc...)							
<p>Los complejos pentacoordinados de iones metálicos del bloque d presentan geometrías de coordinación intermedias entre bipirámide trigonal y pirámide cuadrada. El tipo y grado de distorsión es muy variado ya que como en el caso del ion Cu(II) sus complejos intercambian ambas geometrías sin un aporte muy grande de energía.</p> <p>En este trabajo se aplicará un método sencillo para, a partir de análisis de los datos estructurales obtenidos de la Base de datos cristalográfica de Cambridge, establecer el mecanismo de Berry por el cual una serie de complejos del tipo $[M(\text{ligando bidentado})_2(\text{ligando monodentado})]$ y geometría de bipirámide trigonal se distorsionan hacia pirámide cuadrada.</p> <p>El plan de trabajo puede desglosarse en las siguientes tareas:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1- Selección del ion metálico y ligandos bidentados sobre los que se van a realizar el estudio. 2- Búsqueda de complejos pentacoordinados y geometría de bipirámide trigonal en la Base cristalográfica de Cambridge. 3- Obtención de datos estructurales de esos compuestos (distancias y ángulos de enlace). 4- Análisis de los datos y obtención de conclusiones. <p>El objetivo del trabajo es deducir que factores estructurales influyen en el mecanismo de distorsión seguido por un complejo con geometría de bipirámide trigonal hacia pirámide cuadrada.</p>							
OBSERVACIONES							

DATOS DEL DIRECTOR/A O DIRECTORES (*)	
APELLIDOS, NOMBRE	LUNA GILES, FRANCISO
Área de conocimiento	QUÍMICA INORGÁNICA
APELLIDOS, NOMBRE	
Área de conocimiento	

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

Fecha de aprobación del Consejo del Departamento:

LUNA GILES
FRANCISCO

Firmado digitalmente
por LUNA GILES
FRANCISCO -

04
'



Vº Bº y Firma del Director del Dpto

LUNA GILES
FRANCISCO

Firmado digitalmente
por LUNA GILES
FRANCISCO -

Firma del Director/es

Vº Bº y Firma de la Entidad Externa

	PROCEDIMIENTO DE GESTIÓN DE LOS TRABAJOS FIN DE ESTUDIOS DE LA FACULTAD DE CIENCIAS DE LA UEX (PR/CL002_FC)	 Facultad de Ciencias
	Asunto: Anexo I PROPUESTA DE TRABAJO FIN DE GRADO	



ANEXO I PROPUESTA DE TRABAJO FIN DE GRADO

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

-GRADO: Grado en Química

CARACTERÍSTICAS DEL TRABAJO									
TÍTULO		Adsorción de metales pesados con carbones nanoestructurados							
TIPO DE TRABAJO (señalar con una cruz el que proceda)									
Teórico		Revisión bibliográfica		Númérico		Informes		Computacional	
Experimental		Proyectos de diseño industrial (tipo A)		Estudios e informes técnicos (tipo B)		Trabajos de investigación o de investigación y desarrollo (tipo C)			X
Otros (especifíquese)									
DESCRIPCIÓN (Objetivos, metodología, etc...)									
<p>El objetivo es preparar carbones mixtos activados/hidrotermales y emplearlos como adsorbentes de metales pesados en disolución acuosa.</p> <p>Se prepararán estos materiales por el método hidrotermal. Después se realizarán ensayos para seleccionar los mejores adsorbentes. Una vez seleccionados, se estudiará la cinética del proceso, la capacidad mediante la isoterma de adsorción y la influencia del pH y la temperatura.</p>									
OBSERVACIONES									
DATOS DEL DIRECTOR/A O DIRECTORES (*)									
APELLIDOS, NOMBRE		Durán Valle, Carlos Javier							
Área de conocimiento		Química Inorgánica							
APELLIDOS, NOMBRE									
Área de conocimiento									

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



	PROCEDIMIENTO DE GESTIÓN DE LOS TRABAJOS FIN DE ESTUDIOS DE LA FACULTAD DE CIENCIAS DE LA UEX (PR/CL002_FC)	
	Asunto: Anexo I PROPUESTA DE TRABAJO FIN DE GRADO	

ANEXO I PROPUESTA DE TRABAJO FIN DE GRADO

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

-GRADO: Química

CARACTERÍSTICAS DEL TRABAJO							
TÍTULO	Electrodos basados en nanotubos de carbono modificados para detectar biomoléculas y compuestos farmacéuticos.						
TIPO DE TRABAJO (señalar con una cruz el que proceda)							
Teórico	Revisión bibliográfica	X	Numérico		Informes		Computacional
Experimental	Proyectos de diseño industrial (tipo A)		Estudios e informes técnicos (tipo B)		Trabajos de investigación o de investigación y desarrollo (tipo C)		
Otros (especifíquese)							
DESCRIPCIÓN (Objetivos, metodología, etc...)							
<p>Además del diamante, el grafito, el grafeno y el fullereno (C₆₀), los nanotubos de carbono (CNT) son otra forma importante de carbono. Los CNT constituyen una de las nanoestructuras de carbono más novedosas. Desde su descubrimiento en 1991 por Sumio Iijima han suscitado el interés de la comunidad científica de todo el mundo, debido a sus notables propiedades, que hacen de ellos un material muy singular y con un amplio abanico de aplicaciones. Entre éstas cabe destacar su empleo en recubrimientos y películas, microelectrónica, almacenamiento de energía, medio ambiente o biotecnología. Uno de los aspectos en los que la tecnología de los CNT está centrando más atención es el de su uso en electrodos para biosensores.</p> <p>El trabajo de revisión bibliográfica que se propone comenzará ofreciendo una perspectiva general de los electrodos basados en materiales de carbono para biosensores. A continuación, se analizarán las ventajas de los nanotubos de carbono en comparación con otros materiales carbonosos y se describirán distintos procedimientos de síntesis de nanotubos de carbono con propiedades definidas. Se estudiará la aplicación de los CNT en materiales compuestos, también con especial énfasis en su empleo en electrodos para biosensores. Por último, se analizarán algunas perspectivas y aplicaciones futuras.</p>							
OBSERVACIONES							
<p>Dado que se trata de un trabajo de revisión bibliográfica, y puesto que la mayor parte de la bibliografía de referencia se encuentra publicada en inglés, es EXTREMADAMENTE RECOMENDABLE que el/la estudiante cuente con un nivel acreditado B2 o equivalente en dicha lengua.</p> <p>Igualmente, se recomienda haber cursado y superado las asignaturas <i>Química del estado sólido</i> y <i>Química inorgánica industrial</i></p>							
DATOS DEL DIRECTOR/A O DIRECTORES (*)							
APELLIDOS, NOMBRE	Eduardo Manuel Cuerda Correa						
Área de conocimiento	Química Inorgánica						

	PROCEDIMIENTO DE GESTIÓN DE LOS TRABAJOS FIN DE ESTUDIOS DE LA FACULTAD DE CIENCIAS DE LA UEX (PR/CL002_FC)	 Facultad de Ciencias
	Asunto: Anexo I PROPUESTA DE TRABAJO FIN DE GRADO	

ANEXO I PROPUESTA DE TRABAJO FIN DE GRADO

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

-GRADO: en Química

CARACTERÍSTICAS DEL TRABAJO									
TÍTULO	Uso de Autocad Plant 3D para el proyecto de ingeniería química								
TIPO DE TRABAJO (señalar con una cruz el que proceda)									
Teórico	<input type="checkbox"/>	Revisión bibliográfica	<input type="checkbox"/>	Numérico	<input type="checkbox"/>	Informes	<input type="checkbox"/>	Computacional	<input type="checkbox"/>
Experimental	<input type="checkbox"/>	Proyectos de diseño industrial (tipo A)	<input checked="" type="checkbox"/>	Estudios e informes técnicos (tipo B)	<input type="checkbox"/>	Trabajos de investigación o de investigación y desarrollo (tipo C)			<input type="checkbox"/>
Otros (especificítese)									
DESCRIPCIÓN (Objetivos, metodología, etc...)									
Utilización detallada del software de Autocad Plant 3D para la redacción de un proyecto básico de ingeniería química.									
OBSERVACIONES									
El alumno debe dominar el diseño de ingeniería de procesos, y tener una buena visión espacial y aptitudes para los sistemas BIM.									
DATOS DEL DIRECTOR/A O DIRECTORES (*)									
APELLIDOS, NOMBRE	Martínez de Salazar Martínez, Enrique								
Área de conocimiento	Proyectos								

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

Fecha de aprobación del Consejo del Departamento: 29/09/22

Vº Bº y Firma del Director del Dpto.

Firma del director