

**TEMA TRABAJO FIN DE GRADO
GRADO EN QUIMICA**

TUTOR DEL PROYECTO: BEGOÑA MILIÁN MEDINA

TUTOR ACADÉMICO: BEGOÑA MILIÁN MEDINA

TITULO PROVISIONAL

Acoplamiento vibrónico en cristales orgánicos.

OBJETIVOS

Estudiar desde una perspectiva computacional el espectro electrónico de cristales moleculares orgánicos, dada su importancia en el campo de los dispositivos optoelectrónicos basados en sistemas orgánicos conjugados.

Para ello será necesario familiarizarse con los programas más utilizados de cálculo químico-cuántico, así como con las metodologías más adecuadas para el tratamiento de sistemas en sus estados fundamental y excitado.

El estudio se centrará en cristales moleculares para los cuales se conoce la estructura de rayos X.

METODOLOGÍA

1.- Iniciación al cálculo químico-cuántico de propiedades de sistemas orgánicos conjugados en estado fundamental (elección de metodología, calibrado, optimización de geometría, estructura electrónica y propiedades vibracionales).

2.- Cálculo de propiedades de estados excitados (geometría, espectro vibracional, energía y descripción) utilizando técnicas dependientes del tiempo.

3.- Cálculo *ab initio* de acoplamientos vibrónicos de dímeros de moléculas en un entorno cristalino.

4.- Simulación del espectro electrónico del sistema estudiado.

**TEMA TRABAJO FIN DE GRADO
GRADO EN QUIMICA**

TUTOR DEL PROYECTO: Alfredo M.J. Sánchez de Merás

TUTOR ACADÉMICO: Alfredo M.J. Sánchez de Merás.

TITULO PROVISIONAL

Implementación de orbitales naturales *coupled cluster*. Aplicación a excitaciones de transferencia de carga.

OBJETIVOS

- Modificación de un código *coupled cluster* para la obtención de orbitales naturales.
- Visualización de los mismos usando programas de representación gráfica como Molden
- Aplicación al estudio del estado de transferencia de carga intramolecular del 4-(N,N-dimetilamino)-benzonitrilo, DMABN

METODOLOGÍA

Se adaptará el programa Dalton, escrito fundamentalmente en Fortran77, para conseguir los objetivos previstos. El código modificado será la herramienta básica para el cálculo posterior de los estados excitados del DMABN.

**TEMA TRABAJO FIN DE GRADO
GRADO EN QUIMICA**

TUTOR DEL PROYECTO: Daniel Roca Sanjuán y Manuela Merchán

TUTOR ACADÉMICO: Daniel Roca Sanjuán y Manuela Merchán

TITULO PROVISIONAL

Mecanismo de regeneración fotoinducida de lesiones en las bases del ADN

OBJETIVOS

El proyecto propuesto se engloba dentro del marco de la reactividad de las bases del ADN con especies reactivas de oxígeno (*reactive oxygen species*, ROS) generadas en abundancia en condiciones de estrés oxidativo. En concreto, se pretende que el estudiante:

- Determine el mecanismo de reacción entre la nucleobase citosina y el radical OH.
- Estudie la fotoquímica de los productos generados.
- Explore canales de regeneración de la base, inducidos por la luz, en los productos hidroxilados.

METODOLOGÍA

El estudiante empleará métodos químico-cuánticos *ab initio* de alto nivel. Principalmente, el método CASSCF/CASPT2, que resulta muy apropiado para llevar a cabo el estudio de fenómenos inducidos por la luz. Además, se hará uso de estrategias computacionales de alta precisión para caracterizar los caminos reactivos de formación de la citosina hidroxilada y para determinar las rutas principales de desactivación energética que ocurren en dichos productos tras absorber luz UV-Vis. Entre dichas estrategias se encuentran cálculos de coordenada intrínseca de reacción (*intrinsic reaction coordinate*, IRC) y camino de mínima energía (*minimum energy path*, MEP).

**TEMA TRABAJO FIN DE GRADO
GRADO EN QUIMICA**

TUTOR DEL PROYECTO: IGNACIO NEBOT GIL

TUTOR ACADÉMICO: IGNACIO NEBOT GIL

TITULO PROVISIONAL

Cálculos químico cuánticos de alta precisión.

OBJETIVOS

Realizar cálculos químico-cuánticos de moléculas, mediante el uso de métodos teóricos que incluyen la correlación electrónica, para probar la eficacia de un nuevo método de diagonalización de matrices y tomando como referencia el método de Davidson.

METODOLOGÍA

Se utilizarán programas de ordenador para la realización de cálculos químico cuánticos que incluyen la correlación electrónica mediante la diagonalización de hamiltonianos efectivos, tipo CASDI o que calculan la energía exacta para una base dada, tipo FCI.

**TEMA TRABAJO FIN DE GRADO
GRADO EN QUIMICA**

TUTOR DEL PROYECTO: Clara M Gómez Clari

TUTOR ACADÉMICO: Clara M Gómez Clari

TITULO PROVISIONAL

Síntesis de nanocomposites basados en nanotubos de carbono y polímeros conductores para aplicaciones termoeléctricas.

OBJETIVOS

Obtención de nanocomposites basados en nanotubos de carbono (SWCNTs y DWCNTs) y Poli(3,4-etilendioxitiofeno) en forma de nanofilm. Caracterización óptica, morfológica y cálculo valor de eficiencia termoeléctrica mediante la medida del efecto Seebeck, la conductividad térmica y eléctrica.

METODOLOGÍA

La metodología a utilizar implicará:

1. Manejo de técnicas espectroscópicas como análisis de espectros ultravioleta-visible-infrarrojo cercano y Raman.
2. Manejo de técnicas de caracterización de transporte eléctrico como conductividad eléctrica, efecto Seebeck, medida de efecto hall.
3. Análisis térmico mediante calorimetría diferencial de barrido modulada y termogravimetría
4. Análisis morfológico mediante microscopía electrónica de barrido y transmisión.

**TEMA TRABAJO FIN DE GRADO
GRADO EN QUIMICA**

TUTOR DEL PROYECTO: Clara M Gómez Clari

TUTOR ACADÉMICO: Clara M Gómez Clari

TITULO PROVISIONAL

Síntesis electroquímica de mezclas de polímeros conductores para aplicaciones termoeléctricas.

OBJETIVOS

El objetivo fundamental se centra en conseguir aumentar la eficiencia termoeléctrica de polímeros conductores mediante la formación de films nanoestructurados en multicapas compuestas por polímeros de diferente naturaleza.

METODOLOGÍA

La metodología a utilizar implicará:

1. Manejo de técnicas espectroscópicas como análisis de espectros ultravioleta-visible-infrarrojo cercano y Raman.
2. Manejo de técnicas electroquímicas.
3. Manejo de técnicas de caracterización de transporte eléctrico como conductividad eléctrica, efecto Seebeck, medida de efecto hall.
4. Análisis térmico mediante calorimetría diferencial de barrido modulada y termogravimetría
5. Análisis morfológico mediante microscopía electrónica de barrido y transmisión.

**TEMA TRABAJO FIN DE GRADO
GRADO EN QUIMICA**

TUTOR DEL PROYECTO: Inmaculada García Cuesta

TUTOR ACADÉMICO: Inmaculada García Cuesta

TITULO PROVISIONAL

Modelización de grafenos dopados: Estudio teórico de las propiedades magnéticas de circumcoroneno y derivados.

OBJETIVOS

Estudio de las propiedades magnéticas de circumcoroneno y de sus derivados dopados, con el fin de analizar el efecto de los heteroátomos en la deslocalización electrónica del sistema policíclico aromático. Para ello, se determinarán susceptibilidades magnéticas, lo que permitirá estudiar los cambios globales de diatropicidad que se producen, y apantallamientos nucleares magnéticos de todos los átomos, lo que proporcionará información específica de los cambios locales en las distintas regiones de los sistemas moleculares.

METODOLOGÍA

El estudio se realizará haciendo uso de métodos mecanocuánticos fundamentalmente DFT, para la determinación de estructuras y Coupled Hartree-Fock para el estudio de propiedades magnéticas

**TEMA TRABAJO FIN DE GRADO
GRADO EN QUIMICA**

TUTOR DEL PROYECTO: Iolanda Porcar Boix

TUTOR ACADÉMICO: Iolanda Porcar Boix

TITULO PROVISIONAL

Los laboratorios de Química Física en los grados de Química en España.

OBJETIVOS

Hacer un estudio comparativo de cómo se imparten los laboratorios de química física en los diferentes grados de química de España.

METODOLOGÍA

Metodología:

- a) Definir con precisión los objetivos del trabajo.
- b) Realizar una búsqueda de información.
- c) Analizar la información obtenida.
- d) Hacer una síntesis de esta información.
- e) Obtener conclusiones.
- f) Elaboración de la memoria y preparación de una presentación pública.

**TEMA TRABAJO FIN DE GRADO
GRADO EN QUIMICA**

TUTOR DEL PROYECTO: Juan Luis Pascual-Ahuir Giner

TUTOR ACADÉMICO: Juan Luis Pascual-Ahuir Giner

TITULO PROVISIONAL

La Química Física en los grados de Química en España.

OBJETIVOS

Hacer un estudio comparativo de como se imparte la química física en los diferentes grados de química de España.

METODOLOGÍA

Metodología: a) Definir con precisión los objetivos del trabajo. b) Realizar una búsqueda de información. b) Analizar la información obtenida. c) Hacer una síntesis de esta información. d) Obtener conclusiones e) Elaboración de la memoria y preparación de una presentación pública.

**TEMA TRABAJO FIN DE GRADO
GRADO EN QUIMICA**

TUTOR DEL PROYECTO: Francisco F. Pérez Pla

TUTOR ACADÉMICO:

TITULO PROVISIONAL

Estudio cinético de la hidrólisis de trisditiolenos de Mo(VI).

OBJETIVOS

- (1) Determinación de la ley cinética de la hidrólisis utilizando la técnica de “stopped-flow”.
- (2) Estudio de la presencia de compuestos intermedios durante la reacción.
- (3) Análisis de las matrices de absorbancia mediante métodos de análisis multivariantes.
- (4) Propuesta de un mecanismo para la reacción.

METODOLOGIA

- (1) Estudio de la interacción entre los complejos trisditioleno y los tioles aromáticos mediante la técnica de stopped-flow.
- (2) Estudio de la cinética del ciclo catalítico de autooxidación mediante cromatografía HPLC-DAD de fase reversa.
- (3) Análisis de datos via programas desarrollados para Matlab/Octave.

**TEMA TRABAJO FIN DE GRADO
GRADO EN QUIMICA**

TUTOR DEL PROYECTO: Francisco F. Pérez Pla

TUTOR ACADÉMICO:

TITULO PROVISIONAL

Estudio de la autooxidación de tioles aromáticos catalizada por trisditiolenos de molibdeno(VI).

OBJETIVOS

- (1) Determinación de la ley cinética de la auto-oxidación.
- (2) Estudio de la presencia de compuestos intermedios durante la reacción.
- (3) Análisis de las matrices de absorbancia mediante métodos de análisis multivariantes.
- (4) Propuesta de un mecanismo para la reacción.

METODOLOGIA

- (1) Estudio de la interacción entre los complejos trisditioleno y los tioles aromáticos mediante la técnica de stopped-flow.
- (2) Estudio de la cinética del ciclo catalítico de autooxidación mediante cromatografía HPLC-DAD de fase reversa.
- (3) Análisis de datos via programas desarrollados para Matlab/Octave.

**TEMA TRABAJO FIN DE GRADO
GRADO EN QUIMICA**

TUTOR DEL PROYECTO: Rosa García Lopera

TUTOR ACADÉMICO: Rosa García Lopera

TITULO PROVISIONAL

La Química General en los grados de Química en España.

OBJETIVOS

Hacer un estudio comparativo de como se imparte la química general en los diferentes grados de química de España.

METODOLOGÍA

Metodología: a) Definir con precisión los objetivos del trabajo. b) Realizar una búsqueda de información. b) Analizar la información obtenida. c) Hacer una síntesis de esta información. d) Obtener conclusiones e) Elaboración de la memoria y preparación de una presentación pública.

**TEMA TRABAJO FIN DE GRADO
GRADO EN QUIMICA**

TUTOR DEL PROYECTO: Rosendo Pou Amérigo

TUTOR ACADÉMICO: Rosendo Pou Amérigo

TITULO PROVISIONAL

Elaboración de una webquest como herramienta de aprendizaje activo para el Grado en Química.

OBJETIVOS

Se pretende que el/la estudiante:

- 1) Descubra las características y las posibilidades de una herramienta didáctica denominada webquest, un instrumento para el aprendizaje guiado que hace uso de recursos de internet.
- 2) Diseñe y elabore una webquest original de temática química para su empleo con estudiantes de Grado.
- 3) Valide dicha herramienta mediante su aplicación real con un grupo de estudiantes y analice de forma crítica sus fortalezas y debilidades.

METODOLOGÍA

Para llevar a cabo la propuesta, el/la estudiante deberá, en primer lugar, recopilar información sobre una herramienta didáctica que, a priori, desconoce, analizar ejemplos desarrollados por otros, aprender cuáles son las claves e idear, de manera creativa y original, un ejemplo propio de webquest sobre aspectos químicos estudiados durante la titulación (los cuales tendrá que escoger él o ella) y dirigida a estudiantes de Grado, preferiblemente de cursos inferiores. Para ello, el/la estudiante deberá integrar y establecer relaciones entre contenidos de materias diferentes, identificar problemas, fenómenos o situaciones especialmente atractivos, localizar recursos de internet que puedan resultar útiles, analizarlos con espíritu crítico para proceder a su selección, aprender los rudimentos de elaboración de una página web en la que se muestre la tarea a realizar y se proporcione la información esencial, y proceder a su edición. En una última etapa, el/la alumno/a hará una pequeña evaluación de la herramienta creada haciendo uso de diversos métodos de captación de opinión, tanto cuantitativos como cualitativos, de un grupo de estudiantes.

**TEMA TRABAJO FIN DE GRADO
GRADO EN QUIMICA**

TUTOR DEL PROYECTO: Inmaculada García Cuesta

TUTOR ACADÉMICO: Inmaculada García Cuesta

TITULO PROVISIONAL

Caracterización estructural químico-cuántica de cremalleras estéricas en fibras amiloides.

OBJETIVOS

Caracterizar estructuras de distintos tipos de cremalleras estéricas en fibras amiloides. Estudio de complementariedad, estabilidad y efecto sobre la naturaleza de las interacciones, haciendo uso de métodos teóricos químico cuánticos.

METODOLOGÍA

El estudio se realizará haciendo uso de métodos DFT y MP2.

**TEMA TRABAJO FIN DE GRADO
GRADO EN QUIMICA**

TUTOR DEL PROYECTO: Francisco Vicente Pedrós y José Juan García Jareño

TUTOR ACADÉMICO:

José Juan García Jareño y Francisco Vicente Pedrós

TITULO PROVISIONAL

Caracterización Electroquímica de Depósitos Sobre Electrodo (1)

OBJETIVOS

- 1) Manejo de instrumentos de laboratorio de electroquímica
- 2) Iniciarse en la investigación usando modelos eléctricos.
- 3) Aplicar conocimientos de Termodinámica y de Cinética a procesos electródicos
- 4) Profundizar en conceptos de sistemas heterogéneos.
- 5) Correlacionar los fundamentos conceptuales con algunas aplicaciones tecnológicas concretas.

METODOLOGÍA

1. Búsqueda de información bibliográfica sobre el estado del arte.
2. El aprendizaje por descubrimiento. Aplicación del método científico.
3. Realización de experimentos.
4. Tratamiento de datos.
5. Discusión de resultados.
6. Preparación de memoria.

**TEMA TRABAJO FIN DE GRADO
GRADO EN QUIMICA**

TUTOR DEL PROYECTO: Francisco Vicente Pedrós y José Juan García Jareño

TUTOR ACADÉMICO:

José Juan García Jareño y Francisco Vicente Pedrós

TITULO PROVISIONAL

Caracterización Electroquímica de Depósitos Sobre Electrodo (2)

OBJETIVOS

- 1) Manejo de instrumentos de laboratorio de electroquímica
- 2) Iniciarse en la investigación usando modelos eléctricos.
- 3) Aplicar conocimientos de Termodinámica y de Cinética a procesos electródicos
- 4) Profundizar en conceptos de sistemas heterogéneos.
- 5) Correlacionar los fundamentos conceptuales con algunas aplicaciones tecnológicas concretas.

METODOLOGÍA

1. Búsqueda de información bibliográfica sobre el estado del arte.
2. El aprendizaje por descubrimiento. Aplicación del método científico.
3. Realización de experimentos.
4. Tratamiento de datos.
5. Discusión de resultados.
6. Preparación de memoria.

**TEMA TRABAJO FIN DE GRADO
GRADO EN QUIMICA**

TUTOR DEL PROYECTO: Francisco Vicente Pedrós y José Juan García Jareño

TUTOR ACADÉMICO:

José Juan García Jareño y Francisco Vicente Pedrós

TITULO PROVISIONAL

Caracterización Electroquímica de Depósitos Sobre Electrodo (3)

OBJETIVOS

- 1) Manejo de instrumentos de laboratorio de electroquímica
- 2) Iniciarse en la investigación usando modelos eléctricos.
- 3) Aplicar conocimientos de Termodinámica y de Cinética a procesos electródicos
- 4) Profundizar en conceptos de sistemas heterogéneos.
- 5) Correlacionar los fundamentos conceptuales con algunas aplicaciones tecnológicas concretas.

METODOLOGÍA

1. Búsqueda de información bibliográfica sobre el estado del arte.
2. El aprendizaje por descubrimiento. Aplicación del método científico.
3. Realización de experimentos.
4. Tratamiento de datos.
5. Discusión de resultados.
6. Preparación de memoria.

**TEMA TRABAJO FIN DE GRADO
GRADO EN QUIMICA**

TUTOR DEL PROYECTO: Francisco Vicente Pedrós y José Juan García Jareño

TUTOR ACADÉMICO:

José Juan García Jareño y Francisco Vicente Pedrós

TITULO PROVISIONAL

Caracterización Electroquímica de Depósitos Sobre Electrodo (4)

OBJETIVOS

- 1) Manejo de instrumentos de laboratorio de electroquímica
- 2) Iniciarse en la investigación usando modelos eléctricos.
- 3) Aplicar conocimientos de Termodinámica y de Cinética a procesos electródicos
- 4) Profundizar en conceptos de sistemas heterogéneos.
- 5) Correlacionar los fundamentos conceptuales con algunas aplicaciones tecnológicas concretas.

METODOLOGÍA

1. Búsqueda de información bibliográfica sobre el estado del arte.
2. El aprendizaje por descubrimiento. Aplicación del método científico.
3. Realización de experimentos.
4. Tratamiento de datos.
5. Discusión de resultados.
6. Preparación de memoria.