

DEPARTAMENT DE QUÍMICA FÍSICA

24/9/20

NÚMERO	TEMA	TUTOR(S) ACADÈMIC(S)	TUTOR DEL TREBALL (si escau)	TUTOR EXTERNO	Prorroga
1	Síntesis y caracterización de NPs de Ag soportadas sobre partículas de polidopamina/magnetita. Aplicaciones catalíticas: Estudio de la rutas directa y de condensación de Haber para la reducción de nitroareños.	Francisco F. Perez Pla y M. Ángeles Úbeda Picot			
2	Modelado de la actividad biológica mediante la topología molecular: aplicación a la predicción de toxicidad	Jesus Vicente de Julián Ortiz			
3	Mecanismo de activación del receptor de linfocitos T	Jesus Vicente de Julián Ortiz			
4	Bases moleculares del lupus eritematoso: Estructura del complejo TROVE2	Jesus Vicente de Julián Ortiz			
5	Correlación entre propiedades estructurales y electroquímicas del Azul de Prusia	Luis E. Ochando Gómez	Francisco Vicente Pedrós		
6	Validación de funcionales DFT para el cálculo de espectros electrónicos. Aplicación a modelos sencillos	Alfredo Sánchez de Merás			
7	Estudio de propiedades magnéticas en sistemas aromáticos cíclicos.	Inmaculada García Cuesta			
8	APLICACIÓN DE MODELOS QSAR BASADOS EN LA TOPOLOGÍA MOLECULAR PARA EL ESTUDIO DE PROPIEDADES QUÍMICO-FÍSICAS	JORGE GÁLVEZ ÁLVAREZ		RICCARDO ZANNI	
9	DISEÑO IN SILICO DE NUEVAS MOLECULAS BIOLOGICAMENTE ACTIVAS POR TOPOLOGÍA MOLECULAR	RAMÓN GARCÍA-DOMENECH		MARÍA GÁLVEZ-LLOMPART	
10	Electrodeposición de metales en disoluciones de sulfato de cobre y sulfato de cobalto.	José Juan García Jareño y Jerónimo Agrisuelas Vallés			X
11	Efecto del pH en la respuesta electrocrómica de films de azul de Prusia en disoluciones de KCl.	José Juan García Jareño y Jerónimo Agrisuelas Vallés			X
12	Estudio electrocrómico de películas delgadas de PEDOT generadas en medio acuoso.	José Juan García Jareño y Jerónimo Agrisuelas Vallés			X
13	Estudio electrocrómico de películas delgadas de poli-anilina.	José Juan García Jareño y Jerónimo Agrisuelas Vallés			
14	Estudio electrocrómico de películas delgadas de poli-(azul de metileno).	José Juan García Jareño y Jerónimo Agrisuelas Vallés			
15	Estudio electrocrómico de películas delgadas de poli-tiofeno.	José Juan García Jareño y Jerónimo Agrisuelas Vallés			
16	Estudio teórico del mecanismo de reacción de la enzima asparaginasa humana tipo 3.	Ignacio Nilo Tuñón García de Vicuña / José Javier Ruiz Pernía			
17	Estudio teórico del mecanismo de reacción de la enzima tirosina fosfatasa.	Ignacio Nilo Tuñón García de Vicuña / José Javier Ruiz Pernía			
18	Estudio teórico del mecanismo de reacción de la enzima Mpro del SARS-CoV-2	Ignacio Nilo Tuñón García de Vicuña / José Javier Ruiz Pernía			
19	Síntesis de nanopartículas de plata por reducción con aplicación a la desinfección de cerámicas	Rosa M. García Lopera			
20	POLIURETANOS TERMOPLÁSTICOS: DETERMINACIÓN DE PROPIEDADES TÉRMICAS Y MECÁNICAS	CLARA MARIA GÓMEZ CLARI			
21	SÍNTESIS IN-SITU DE POLÍMEROS CONDUCTORES : OPTIMIZACIÓN DE LA CONDUCTIVIDAD ELECTRICA	CLARA MARIA GÓMEZ CLARI			
22	El uso de las tecnologías en el proceso de enseñanza-aprendizaje de la Química: nuevas posibilidades en el ámbito de la ludificación.	Rosendo Pou Américo			
23	Monòmers quirals metal·locomplexants per a la funcionalització de nanopartícules mitjançant polimerització radicalària	Rafael Muñoz-Espí i María González-Bejar (Q. Orgánica)			
24	Nanopartícules polimèriques funcionalitzades amb bases de Schiff per a aplicacions catalítiques	Rafael Muñoz-Espí i Francisco F. Pérez-Pla			
25	Catalitzadors oxidics preparats en miniemulsions sota condicions hidrotermals	Rafael Muñoz-Espí i Francisco F. Pérez-Pla			
26	Diòxid de carboni supercrític com a dissolvent sostenible en la preparació de partícules a partir de sistemes emulsionats	Rafael Muñoz-Espí i Amparo Cháfer Ortega (Enginyeria Química)			
27	Desenvolupament de recobriments polimèrics per a l'emmagatzematge d'energia tèrmica	Rafael Muñoz-Espí i Clara M. Gómez Clari			
28	Tèxtils per a l'emmagatzematge i la conversió d'energia	Rafael Muñoz-Espí i Clara M. Gómez Clari			
29	Efecte ouzo com a estratègia sintètica per a la preparació de nanopartícules catalítiques	Rafael Muñoz-Espí i Francisco F. Pérez-Pla			
30	Espectroscopia de RMN en fluids de interès biomèdic	M.Carmen Martínez Bisbal			
31	Caracterización espectroscópica de la melanina a través de modelos moleculares	Javier Segarra-Martí y Mercedes Rubio	Daniel Roca-Sanjuán		
32	Estudio teórico de lesiones fotoinducidas en el ADN a través de la cicloadición de timinas	Javier Segarra-Martí y Mercedes Rubio	Daniel Roca-Sanjuán		
33	Estudio teórico de la catálisis por agua de la reacción de NH3 con el catión MO+	Lourdes Gracia Edo			
34	Estudios fluidos de interès biomèdic mediante Espectroscopia de RMN	M.Carmen Martínez Bisbal			
35	Caracterización y propiedades magnéticas del complejo de inclusión C70@ [3]CPP4A	Inmaculada García Cuesta y Alfredo Sánchez de Merás			

**TEMA TREBALL FI DE GRAU
 GRAU EN QUÍMICA**

TUTOR/A ACADÈMIC/A: Rosendo Pou Américo

TUTOR/A del TREBALL (si escau)*: _____

TUTOR/A EXTERN/A (si escau): _____

TÍTOL

El uso de las tecnologías en el proceso de enseñanza-aprendizaje de la Química: nuevas posibilidades en el ámbito de la ludificación.

OBJECTIUS

En este trabajo se pretende llevar a cabo una revisión bibliográfica exhaustiva de la presencia y del impacto que los avances tecnológicos están teniendo en la docencia de la Química y en la obtención de aprendizajes más significativos por parte del estudiantado. Dicho análisis se focalizará, de un modo particular, en el terreno de la ludificación, mostrando las ventajas y los inconvenientes de las herramientas y estrategias más empleadas en la actualidad.

METODOLOGIA

La parte nuclear del trabajo será una revisión bibliográfica lo más completa posible, para la cual se emplearán las metodologías habituales en cualquier trabajo científico, haciendo uso de las herramientas disponibles en la Universidad (motores de búsqueda, bases de datos, publicaciones nacionales e internacionales, etc...), así como aquéllas a las que se pueda tener acceso a través de internet. En el caso de que la pandemia lo permita, se plantearía una parte final en la que se trataría de crear un ejemplo de actividad de ludificación vinculada a algunos de los contenidos de Química que se trabajan en Bachillerato (o en un curso de Química General de primero de un grado universitario de ciencias). La ludificación, o gamificación, consiste en el uso de técnicas, elementos y dinámicas propias de los juegos y el ocio en educación con el fin de potenciar la motivación y activar el aprendizaje. Dicha propuesta se probaría con alumnado real, si la situación sanitaria lo permitiese, para comprobar sus posibilidades reales y su utilidad.

* només en el cas de què algun dels tutors no complisca els requisits per a ser tutor acadèmic



TEMA TREBALL FI DE GRAU
 GRAU EN QUÍMICA

TUTOR/A ACADÈMIC/A: CLARA MARIA GÓMEZ CLARI

TUTOR/A del TREBALL (si escau)*: RAFAEL ABARGUES LOPEZ

TUTOR/A EXTERN/A (si escau):

TÍTOL

SÍNTESIS IN-SITU DE POLÍMEROS CONDUCTORES : OPTIMIZACIÓN DE LA CONDUCTIVIDAD ELECTRICA

OBJECTIUS

El objetivo del trabajo es obtener películas con una matriz de poliuretano en la que se encuentren dispersas diferentes nanopartículas metálicas y que presenten alta conductividad eléctrica para ser utilizados en aplicaciones termoeléctricas y de conservación de energía.

El proyecto consta de varios objetivos parciales:

1. Formación de películas flexibles de un polímero conductor en una matriz termo plástica atenuadas en presencia de sales metálicas oxidantes.
2. Estudio de la relación molar oxidante:oligómero.
3. Estudio de la curva de percolación.
4. Caracterización de las propiedades conductoras y ópticas de las películas obtenidas.

METODOLOGIA

Es un proyecto experimental.

El/la alumno/a realizara diferentes disoluciones, variando la relación molar de los diferentes componentes: monómero, sales oxidantes y polímero. Obtendrá películas por el método de spin coating a partir de las disoluciones. Tendrá que optimizar el método para obtener películas en las que las nanopartículas se encuentren bien dispersas. Una vez obtenidas las películas tendrá que determinar la conductividad eléctrica, el efecto Seebeck y su morfología.

* només en el cas de que algun dels tutors no complisca els requisits per a ser tutor acadèmic



TEMA TREBALL FI DE GRAU
 GRAU EN QUÍMICA

TUTOR/A ACADÈMIC/A: CLARA MARIA GÓMEZ CLARI

TUTOR/A del TREBALL (si escau)*:

TUTOR/A EXTERN/A (si escau):

TÍTOL

POLIURETANOS TERMOPLÁSTICOS: DETERMINACIÓN DE PROPIEDADES TÉRMICAS Y MECÁNICAS

OBJECTIUS

El objetivo del presente proyecto es sintetizar sin disolvente poliuretanos basados en diferentes grados de policarbonatodiol y caracterizar sus propiedades mecánicas y térmicas con la finalidad de obtener materiales con mayor resistencia térmica y mecánica.

METODOLOGIA

El proyecto es experimental.
 El alumno realizara la síntesis de los diferentes poliuretanos, obtendrá placas para su caracterización. Realizara la caracterización térmica por calorimetria diferencial de barrido y análisis termogravimetrico y la caracterización mecánica de las propiedades de resistencia a la tracción y a la abrasión.

* només en el cas de que algun dels tutors no complisca els requisits per a ser tutor acadèmic



(segell del Departament)

**TEMA TREBALL FI DE GRAU
 GRAU EN QUÍMICA**

TUTOR/A ACADÈMIC/A: ROSA M. GARCÍA LOPERA

TUTOR/A del TREBALL (si escau)*:

TUTOR/A EXTERN/A (si escau): SERGIO CONEJOS VIDAL

TÍTOL

Síntesis de nanopartículas de plata por reducción con aplicación a la desinfección de cerámicas

OBJECTIUS

1. Sintetizar nanopartículas de plata
2. Estudiar su aplicación y eficacia en la desinfección de cerámicas.
3. Iniciar al estudiante en un trabajo de investigación.
4. Iniciar al estudiante en un trabajo de laboratorio de empresa

METODOLOGIA

A partir de nitrato de plata y por reducción con borohidruro de sodio y un estabilizante se conseguirán sintetizar nanopartículas de plata de diferentes tamaños.

Dichas nanopartículas, su tamaño y eficacia se caracterizarán mediante Espectroscopía UV-Visible y Dispersión de luz (LDS).

Para comprobar su eficacia en la desinfección de cerámicas, estas nanopartículas se recubren por silanos, para conseguir su porosidad. Este recubrimiento, además, también permite estabilizar la cocción del material cerámico.

* només en el cas de que algun dels tutors no complisca els requisits per a ser tutor acadèmic



**TEMA TREBALL FI DE GRAU
 GRAU EN QUÍMICA**

TUTOR/A ACADÈMIC/A: Ignacio Nilo Tuñón García de Vicuña / José Javier Ruiz Pernía

TUTOR/A del TREBALL (si escau)*: _____

TUTOR/A EXTERN/A (si escau): _____

TÍTOL

Estudio teórico del mecanismo de reacción de la enzima Mpro del SARS-CoV-2

OBJECTIUS

Construcción de un modelo representativo del centro activo de la enzima en estudio.
 Optimización del modelo reducido de una conformación o estructura de rayos X de la enzima.
 Estudio del mecanismo de reacción de la enzima estableciendo las diferentes etapas y las barreras de energía potencial. Determinación de las barreras de energía libre.
 Comparación de las propiedades cinéticas del modelo construido con los datos experimentales disponibles.

METODOLOGIA

Se utilizarán métodos de cálculo de Química Cuántica.
 Fundamentalmente programa gaussian. Además se usarán programas de visualización de estructuras, tal como:molden y gaussview.
 Localización de los posibles estados de transición del proceso catalítico.
 Determinación de la constante de velocidad para cada uno de las etapas de la reacción analizadas.

* només en el cas de què algun dels tutors no complisca els requisits per a ser tutor acadèmic



(segell del Departament)

TEMA TREBALL FI DE GRAU
 GRAU EN QUÍMICA

TUTOR/A ACADÈMIC/A: José Javier Ruiz Pernía / Ignacio Nilo Tuñón García de Vicuña

TUTOR/A del TREBALL (si escau)*: _____

TUTOR/A EXTERN/A (si escau): _____

TÍTOL

Estudio teórico del mecanismo de reacción de la enzima tirosina fosfatasa.

OBJECTIUS

Construcción de un modelo representativo del centro activo de la enzima en estudio.
 Optimización del modelo reducido de una conformación o estructura de rayos X de la enzima.
 Estudio del mecanismo de reacción de la enzima estableciendo las diferentes etapas y las barreras de energía potencial. Determinación de las barreras de energía libre.
 Comparación de las propiedades cinéticas del modelo construido con los datos experimentales disponibles.

METODOLOGIA

Se utilizarán métodos de cálculo de Química Cuántica.
 Fundamentalmente programa gaussian. Además se usarán programas de visualización de estructuras, tal como:molden y gaussview.
 Localización de los posibles estados de transición del proceso catalítico.
 Determinación de la constante de velocidad para cada uno de las etapas de la reacción analizadas.

* només en el cas de que algun dels tutors no complisca els requisits per a ser tutor acadèmic



**TEMA TREBALL FI DE GRAU
 GRAU EN QUÍMICA**

TUTOR/A ACADÈMIC/A: Ignacio Nilo Tuñón García de Vicuña / José Javier Ruiz Pernía

TUTOR/A del TREBALL (si escau)*: _____

TUTOR/A EXTERN/A (si escau): _____

TÍTOL

Estudio teórico del mecanismo de reacción de la enzima asparaginasa humana tipo 3.

OBJECTIUS

Construcción de un modelo representativo del centro activo de la enzima en estudio.
 Optimización del modelo reducido de una conformación o estructura de rayos X de la enzima.
 Estudio del mecanismo de reacción de la enzima estableciendo las diferentes etapas y las barreras de energía potencial. Determinación de las barreras de energía libre.
 Comparación de las propiedades cinéticas del modelo construido con los datos experimentales disponibles.

METODOLOGIA

Se utilizarán métodos de cálculo de Química Cuántica.
 Fundamentalmente programa gaussian. Además se usarán programas de visualización de estructuras, tal como:molden y gaussview.
 Localización de los posibles estados de transición del proceso catalítico.
 Determinación de la constante de velocidad para cada uno de las etapas de la reacción analizadas.

* només en el cas de que algun dels tutors no complisca els requisits per a ser tutor acadèmic



TEMA TREBALL FI DE GRAU
 GRAU EN QUÍMICA

TUTOR/A ACADÈMIC/A: José Juan García Jareño y Jerónimo Agrisuelas Vallés

TUTOR/A del TREBALL (si escau)*: _____

TUTOR/A EXTERN/A (si escau): _____

TÍTOL

Estudio electrocrómico de películas delgadas de poli-tiofeno.

OBJECTIUS

Preparación de electrodos para el electrodeposición.
 Polimerizar politiofeno sobre electrodos de ITO.
 Correlacionar la información electroquímica y cambios de color superficiales.

METODOLOGIA

1. Estudio bibliográfico
2. Introducción a las técnicas electroquímicas.
3. Preparación de electrodos.
4. Diseño de experiencias electroquímicas registradas en vídeo digital.
5. Análisis de resultados obtenidos y discusión.
6. Redacción de la memoria de TFG.

* només en el cas de que algun dels tutors no complisca els requisits per a ser tutor acadèmic

(segell del Departament)



TEMA TREBALL FI DE GRAU
 GRAU EN QUÍMICA

TUTOR/A ACADÈMIC/A: José Juan García Jareño y Jerónimo Agrisuelas Vallés

TUTOR/A del TREBALL (si escau)*: _____

TUTOR/A EXTERN/A (si escau): _____

TÍTOL

Estudio electrocrómico de películas delgadas de poli-(azul de metileno).

OBJECTIUS

Preparación de electrodos para el electrodeposición.
 Polimerizar poli(azul de metileno) sobre electrodos de ITO.
 Correlacionar la información electroquímica y cambios de color superficiales.

METODOLOGIA

1. Estudio bibliográfico
2. Introducción a las técnicas electroquímicas.
3. Preparación de electrodos.
4. Diseño de experiencias electroquímicas registradas en vídeo digital.
5. Análisis de resultados obtenidos y discusión.
6. Redacción de la memoria de TFG.

* només en el cas de què algun dels tutors no complisca els requisits per a ser tutor acadèmic

(segell del Departament)



TEMA TREBALL FI DE GRAU
 GRAU EN QUÍMICA

TUTOR/A ACADÈMIC/A: José Juan García Jareño y Jerónimo Agrisuelas Vallés

TUTOR/A del TREBALL (si escau)*: _____

TUTOR/A EXTERN/A (si escau): _____

TÍTOL

Estudio electrocrómico de películas delgadas de poli-anilina.

OBJECTIUS

Preparación de electrodos para el electrodeposición.
 Polimerizar polianilina sobre electrodos de ITO.
 Correlacionar la información electroquímica y cambios de color superficiales.

METODOLOGIA

1. Estudio bibliográfico
2. Introducción a las técnicas electroquímicas.
3. Preparación de electrodos.
4. Diseño de experiencias electroquímicas registradas en vídeo digital.
5. Análisis de resultados obtenidos y discusión.
6. Redacción de la memoria de TFG.

* només en el cas de que algun dels tutors no complisca els requisits per a ser tutor acadèmic



VNIVERSITAT
 @ VALÈNCIA (ò*)
 Facultat de Química

TEMA TRABAJO FIN DE GRADO
 GRADO EN QUÍMICA

TUTOR/A ACADÉMICO/A: José Juan García Jareño y Jerónimo Agrisuelas Vallés

TUTOR/A del TRABAJO (si procede)*: _____

TUTOR/A EXTERNO/A (si procede): _____

TÍTULO

Estudio electrocrómico de películas delgadas de PEDOT generadas en medio acuoso.

OBJETIVOS

Preparación de electrodos para el electrodeposición.
 Polimerizar PEDOT en medio acuoso sobre electrodos de ITO.
 Correlacionar la información electroquímica y cambios de color superficiales.

METODOLOGIA

1. Estudio bibliográfico
2. Introducción a las técnicas electroquímicas.
3. Preparación de electrodos.
4. Diseño de experiencias electroquímicas registradas en vídeo digital.
5. Análisis de resultados obtenidos y discusión.
6. Redacción de la memoria de TFG.

* sólo en el caso de que alguno de los tutores no cumpla los requisitos para ser tutor académico

(sello del Departamento)



VNIVERSITAT DE VALÈNCIA (ò*) Facultat de Química

TEMA TRABAJO FIN DE GRADO
GRADO EN QUÍMICA

TUTOR/A ACADÉMICO/A: José Juan García Jareño y Jerónimo Agrisuelas Vallés

TUTOR/A del TRABAJO (si procede)*: _____

TUTOR/A EXTERNO/A (si procede): _____

TÍTULO

Efecto del pH en la respuesta electrocrómica de films de azul de Prusia en disoluciones de KCl.

OBJETIVOS

Estudiar la preparación de films de azul de Prusia sobre electrodos.
Estudiar el efecto del pH en la respuesta electrocrómica del material depositado.
Correlacionar la información electroquímica y cambios de color superficiales.

METODOLOGIA

1. Estudio bibliográfico
2. Introducción a las técnicas electroquímicas.
3. Preparación de electrodos.
4. Diseño de experiencias electroquímicas registradas en vídeo digital.
5. Análisis de resultados obtenidos y discusión.
6. Redacción de la memoria de TFG.

* sólo en el caso de que alguno de los tutores no cumpla los requisitos para ser tutor académico

(sello del Departamento)



VNIVERSITAT DE VALÈNCIA Facultat de Química

TEMA TRABAJO FIN DE GRADO GRADO EN QUÍMICA

TUTOR/A ACADÉMICO/A: José Juan García Jareño y Jerónimo Agrisuelas Vallés

TUTOR/A del TRABAJO (si procede)*: _____

TUTOR/A EXTERNO/A (si procede): _____

TÍTULO

Electrodeposición de metales en disoluciones de sulfato de cobre y sulfato de cobalto.

OBJETIVOS

Preparación de electrodos para el electrodeposito.
Depositar cobre y cobalto sobre materiales composite.
Correlacionar la información electroquímica y cambios de color superficiales.

METODOLOGIA

1. Estudio bibliográfico
2. Introducción a las técnicas electroquímicas.
3. Preparación de electrodos.
4. Diseño de experiencias electroquímicas registradas en vídeo digital.
5. Análisis de resultados obtenidos y discusión.
6. Redacción de la memoria de TFG.

* sólo en el caso de que alguno de los tutores no cumpla los requisitos para ser tutor académico

(sello del Departamento)



TEMA TREBALL FI DE GRAU
GRAU EN QUÍMICA

TUTOR/A ACADÈMIC/A: RAMÓN GARCÍA-DOMENECH

TUTOR/A del TREBALL (si escau)*:

TUTOR/A EXTERN/A (si escau): MARÍA GÁLVEZ-LLOMPART

TÍTOL

DISEÑO IN SILICO DE NUEVAS MOLECULAS BIOLOGICAMENTE ACTIVAS POR TOPOLOGÍA MOLECULAR

OBJECTIUS

Formar al estudiante en los conceptos básicos y herramientas informáticas principales para el diseño molecular de nuevos compuestos potencialmente activos como fármacos, pesticidas, nuevos materiales, etc.

METODOLOGIA

Se pretende que el estudiante adquiera nociones básicas sobre los índices topológicos. Sobre manejo de programas específicos (programa Dragon), así como sobre las técnicas de establecimiento de relaciones QSAR (Programa STATISTICA).

* només en el cas de que algun dels tutors no complisca els requisits per a ser tutor acadèmic



TEMA TREBALL FI DE GRAU
 GRAU EN QUÍMICA

TUTOR/A ACADÈMIC/A: JORGE GÁLVEZ ÁLVAREZ

TUTOR/A del TREBALL (si escau)*:

TUTOR/A EXTERN/A (si escau): RICCARDO ZANNI

TÍTOL

APLICACIÓN DE MODELOS QSAR BASADOS EN LA TOPOLOGÍA MOLECULAR PARA EL ESTUDIO DE PROPIEDADES QUÍMICO-FÍSICAS

OBJECTIUS

- Que el estudiante adquiriera una base sólida en el conocimiento de los métodos QSAR basados en la topología molecular
- Que el estudiante se inicie en el manejo de programas básicos para el cálculo de índices topológicos y de algunas propiedades químico-físicas.
- Que se interpreten las posibles relaciones entre los descriptores topológicos y dichas propiedades químico-físicas.

METODOLOGIA

- Elaboración de una introducción elemental a la topología molecular
- Cálculo de los índices topológicos más importantes (Randic, Kier y Hall, topológicos de carga, etc.) usando el software Dragon.
- Establecimiento de correlaciones entre los índices y distintas propiedades químico-físicas bien a partir de la literatura, bien calculadas con software específico.

* només en el cas de que algun dels tutors no complisca els requisits per a ser tutor acadèmic



TEMA TREBALL FI DE GRAU
GRAU EN QUÍMICA

TUTOR/A ACADÈMIC/A: Inmaculada García Cuesta

TUTOR/A del TREBALL (si escau)*: _____

TUTOR/A EXTERN/A (si escau): _____

TÍTOL

Estudio de propiedades magnéticas en sistemas aromáticos cíclicos.

OBJECTIUS

Estudiar, mediante métodos teóricos, la respuesta local a un campo magnético externo perpendicular al plano molecular de sistemas aromáticos cíclicos, a través de propiedades magnéticas y de mapas de densidad de corriente.

METODOLOGIA

El estudio se realizará haciendo uso de métodos mecanocuánticos fundamentalmente, DFT y/o CCSDT para la determinación de estructuras y, CTOCD (Continua transformación de la densidad de corriente) a nivel Coupled Hartree-Fock (CHF) y GIAOS, para el estudio de propiedades magnéticas y corrientes independiente del origen de gauge.

* només en el cas de que algun dels tutors no complisca els requisits per a ser tutor acadèmic



TEMA TREBALL FI DE GRAU
 GRAU EN QUÍMICA

Alfredo Sánchez de Merás

TUTOR/A ACADÈMIC/A: _____

TUTOR/A del TREBALL (si escau)*: _____

TUTOR/A EXTERN/A (si escau): _____

TÍTOL

Validación de funcionales DFT para el cálculo de espectros electrónicos. Aplicación a modelos sencillos

OBJECTIUS

Determinar la validez de distintas aproximaciones DFT para determinar espectros electrónicos

METODOLOGIA

Se escogerán distintos fragmentos de complejos de inclusión para caracterizar su espectro a nivel DFT con distintos funcionales de correlación e intercambio y se compararán los resultados obtenidos con cálculos de referencia coupled cluster y valores experimentales disponibles

* només en el cas de que algun dels tutors no complisca els requisits per a ser tutor acadèmic



(segell del Departament)

**TEMA TREBALL FI DE GRAU
 GRAU EN QUÍMICA**

Luis E. Ochando Gómez

TUTOR/A ACADÈMICA/A: _____

Francisco Vicente Pedrós

TUTOR/A del TREBALL (si escau)*: _____

TUTOR/A EXTERN/A (si escau): _____

TÍTOL

Correlación entre propiedades estructurales y electroquímicas del Azul de Prusia

OBJECTIUS

- Correlacionar la morfología estructural con el procedimiento de síntesis de este hexacianoferrato.
- Comparar las propiedades electrocromáticas de este material generado mediante la aplicación de electricidad con el generado por vía química.
- Analizar los resultados en aras de la aplicación tecnológica de este pigmento: sensores, membranas, acumuladores de carga o electrolisis del agua.

METODOLOGIA

- 1) Se aplicarán etapas de potencial para generar films de Azul de Prusia de diferente espesor. Se medirá la carga transferida en función del tiempo, así como la masa depositada.
- 2) Se caracterizarán las muestras mediante técnicas ópticas y espectroscópicas de los materiales.
- 3) Se observarán y analizarán las muestras por técnicas microscópicas
- 4) Se caracterizarán las muestras por técnicas basadas en RX
- 5) Se correlacionarán las propiedades estructurales con su comportamiento electroquímico, atendiendo a los resultados experimentales y a la bibliografía sobre el tema.

* només en el cas de què algun dels tutors no complisca els requisits per a ser tutor acadèmic



(segell del Departament)

TEMA TREBALL FI DE GRAU
 GRAU EN QUÍMICA

TUTOR/A ACADÈMIC/A: Jesus Vicente de Julián Ortiz

TUTOR/A del TREBALL (si escau)*: _____

TUTOR/A EXTERN/A (si escau): _____

TÍTOL

Bases moleculares del lupus eritematoso: Estructura del complejo TROVE2

OBJECTIUS

Aprendizaje de modelización molecular para el estudio de las interacciones en las que interviene el complejo Ro52-TROVE2.

METODOLOGIA

Consistirá en técnicas de modelización molecular, tales como dinámica molecular, para determinar la estructura tridimensional de los distintos dominios de la ribonucleoproteína del sistema inmune TROVE2 y su interacción con otras proteínas como Ro52/TRIM21, para investigar su papel en el lupus eritematoso.

* només en el cas de que algun dels tutors no complisca els requisits per a ser tutor acadèmic



(segell del Departament)

TEMA TREBALL FI DE GRAU
GRAU EN QUÍMICA

TUTOR/A ACADÈMIC/A: Jesus Vicente de Julián Ortiz

TUTOR/A del TREBALL (si escau)*:

TUTOR/A EXTERN/A (si escau):

TÍTOL

Mecanismo de activación del receptor de linfocitos T

OBJECTIUS

Aprendizaje de modelización molecular para el estudio de las interacciones en las que interviene el complejo Receptor de Linfocitos T.

METODOLOGIA

Consistirá en técnicas de modelización molecular, tales como dinámica molecular, para determinar la estructura tridimensional del complejo formado por el receptor de linfocitos T y de sus componentes, y del modo que interaccionan con las células presentadoras de antígeno. Cabe la posibilidad de diseñar y realizar experimentos de laboratorio para verificar las hipótesis que se planteen.

* només en el cas de que algun dels tutors no complisca els requisits per a ser tutor acadèmic



TEMA TREBALL FI DE GRAU
 GRAU EN QUÍMICA

TUTOR/A ACADÈMIC/A: Jesus Vicente de Julián Ortiz

TUTOR/A del TREBALL (si escau)*: _____

TUTOR/A EXTERN/A (si escau): _____

TÍTOL

Modelado de la actividad biológica mediante la topología molecular: aplicación a la predicción de toxicidad

OBJECTIUS

Aprendizaje de la elaboración de modelos matemáticos basados en descriptores moleculares para la predicción de toxicidad.

METODOLOGIA

En primer lugar se realizará una revisión bibliográfica para recopilar datos de toxicidad de un grupo de compuestos determinado. A continuación se calculará un conjunto de descriptores topológicos que cuantifiquen diversos aspectos de la estructura molecular, pero que sean independientes de las conformaciones de las moléculas. Posteriormente, se buscarán modelos matemáticos, estadísticos o de aprendizaje automático, para la predicción de la toxicidad para moléculas no incluidas en el grupo de entrenamiento del modelo, mediante técnicas de validación cruzada.

* només en el cas de què algun dels tutors no complisca els requisits per a ser tutor acadèmic



TEMA TREBALL FI DE GRAU
 GRAU EN QUÍMICA

TUTOR/A ACADÈMIC/A: Francisco F. Perez Pla y M. Ángeles Úbeda Picot

TUTOR/A del TREBALL (si escau)*: _____

TUTOR/A EXTERN/A (si escau): _____

TÍTOL

Síntesis y caracterización de NPs de Ag soportadas sobre partículas de polidopamina/magnetita. Aplicaciones catalíticas: Estudio de la rutas directa y de condensación de Haber para la reducción de nitroarenos.

OBJECTIUS

- Síntesis del soporte de magnetita.
- Recubrimiento de la magnetita con polidopamina.
- Inmovilización de nanopartículas de Ag sobre el soporte sintetizado.
- Caracterización de los materiales sintetizados.
- Estudio de la actividad catalítica en la reducción de nitroarenos.

METODOLOGIA

A. SÍNTESIS DEL SOPORTE: Síntesis de magnetita y recubrimiento con polidopamina .
 B. SÍNTEISIS DEL CATALIZADOR: Inmovilización del cationes Ag(I) y formación de nanopartículas del metal.
 C. CARACTRIZACIÓN DE LOS MATERIALES: Utilización de las técnicas EDX, RX, SEM, TEM, FTIR, ATG, isothermas de adsorción de N₂.
 D. ESTUDIO DE LA ACTIVIDAD CATALÍTICA: estudio de la actividad, rendimiento y selectividad. Estudio de la reciclabilidad mediante las técnicas: HPLC, ¹H RMN, CG.

* només en el cas de que algun dels tutors no complisca els requisits per a ser tutor acadèmic



TEMA TREBALL FI DE GRAU
 GRAU EN QUÍMICA

TUTOR/A ACADÈMIC/A: Rafael Muñoz-Espí i María González-Bejar (Q. Orgànica)

TUTOR/A del TREBALL (si escau)*: _____

TUTOR/A EXTERN/A (si escau): _____

TÍTOL

Monòmers quirals metal·locomplexants per a la funcionalització de nanopartícules mitjançant polimerització radicalària

OBJECTIUS

- Selecció de lligands quirals amb utilitat potencial en catàlisi asimètrica que puguen ser derivatitzats per fer-los reactius en polimerització radicalària
- Establiment de les rutes de síntesi dels lligands polimeritzables
- Optimització dels paràmetres de síntesi i caracterització dels compostos
- Síntesi de nanopartícules copolimèriques que continguen els lligands preparats
- Avaluació de les aplicacions més adequades per als sistemes preparats, tant termodinàmiques (complexació) com cinètiques (catàlisi)

METODOLOGIA

El projecte començarà amb la preparació de lligands que puguen incorporar-se covalentment a la superfície de nanopartícules polimèriques preparades mitjançant la tècnica de la polimerització en miniemulsió. Cal que els lligands incorporen funcionalitats capaces de complexar ions metàl·lics (p. ex. derivats del lligand BINAP). Es farà una selecció dels compostos que es consideren més interessants i més viables sintèticament. Després de l'establiment de les rutes sintètiques dels lligands polimeritzables, es realitzarà la caracterització dels compostos obtinguts mitjançant les tècniques analítiques convencionals de la caracterització estructural, incloent-hi la ressonància magnètica nuclear (NMR).

En la segona fase es prepararan nanopartícules polimèriques a partir d'un monòmer de base (p. ex. estirè) i els lligands polimeritzables preparats en l'etapa anterior. S'optimitzaran els paràmetres de síntesi i es realitzarà la caracterització col·loidal dels sistemes mitjançant difusió de la llum dinàmica (DLS) i la mesura del potencial zeta. S'estudiarà la capacitat de complexació de metalls (p. ex. Pd, Au, Pt).

La morfologia dels materials finals s'avaluarà mitjançant microscòpia electrònica d'escombratge (SEM) i de transmissió (TEM). Per a la caracterització tèrmica de les nanopartícules s'utilitzarà l'anàlisi termogravimètrica (TGA) i, si escau, la calorimetria diferencial d'escombratge (DSC).

Com a aplicacions dels materials preparats es preveu la complexació de metalls pesants per a aplicacions sostenibles i la catàlisi. La cinètica de les reaccions catalítiques estudiades se seguirà per mitjà de cromatografia líquida d'alta eficàcia (HPLC) o de gasos (GC), segons convinga.

* només en el cas de què algun dels tutors no complisca els requisits per a ser tutor acadèmic



TEMA TREBALL FI DE GRAU
 GRAU EN QUÍMICA

TUTOR/A ACADÈMIC/A: Rafael Muñoz-Espí i Francisco F. Pérez-Pla

TUTOR/A del TREBALL (si escau)*: _____

TUTOR/A EXTERN/A (si escau): _____

TÍTOL

Nanopartícules polimèriques funcionalitzades amb bases de Schiff per a aplicacions catalítiques

OBJECTIUS

- Síntesi de bases de Schiff polimeritzables ("tipus salen") amb capacitat de complexació d'ions metàl·lics
- Optimització dels paràmetres de síntesi de nanopartícules polimèriques que continguen les bases de Schiff preparades
- Complexació de metalls en la superfície de les partícules per a preparar catalitzadors heterogenis
- Caracterització sistemàtica de les nanopartícules polimèriques i híbrides preparades
- Aplicació catalítica de les nanopartícules en reaccions orgàniques d'interès

METODOLOGIA

En primer lloc caldrà optimitzar les rutes de síntesi de lligands polimeritzables derivats del salen, parcialment establertes en un treball anterior. Es realitzarà una caracterització sistemàtica dels compostos obtinguts mitjançant les tècniques analítiques convencionals de la caracterització estructural, incloent-hi la ressonància magnètica nuclear (NMR).

Després de la formació de les partícules polimèriques i de la complexació d'ions metàl·lics en la superfície, la caracterització col·loidal dels sistemes es realitzarà mitjançant difusió de la llum dinàmica (DLS) i la mesura del potencial zeta. La morfologia dels materials s'avaluarà mitjançant microscòpia electrònica d'escombratge (SEM) i de transmissió (TEM). Per a la caracterització tèrmica s'utilitzarà l'anàlisi termogravimètrica (TGA) i, si escau, la calorimetria diferencial d'escombratge (DSC).

El focus principal del treball és l'aplicació catalítica de les partícules obtingudes. Com a metall principal s'utilitzarà pal·ladi, però no s'exclou l'ús d'altres metalls (Au, Ru, Pt) si es considera oportú. Després de la selecció de les reaccions orgàniques d'interès (p. ex. la reacció de Suzuki-Miyaura), es realitzarà un estudi de l'activitat catalítica dels catalitzadors heterogenis preparats. La cinètica de les reaccions catalítiques estudiades se seguirà per mitjà de cromatografia líquida d'alta eficàcia (HPLC) o de gasos (GC), segons convinga.

* només en el cas de que algun dels tutors no complisca els requisits per a ser tutor acadèmic



**TEMA TREBALL FI DE GRAU
 GRAU EN QUÍMICA**

TUTOR/A ACADÈMIC/A: Rafael Muñoz-Espí i Francisco F. Pérez-Pla

TUTOR/A del TREBALL (si escau)*: _____

TUTOR/A EXTERN/A (si escau): _____

TÍTOL

Catalitzadors oxídics preparats en miniemulsions sota condicions hidrotermals

OBJECTIUS

- Preparació de catalitzadors de caràcter oxídic amb metalls de transició mitjançant la combinació de la tècnica de la miniemulsió amb condicions de síntesi hidrotermal
- Avaluació de la influència de condicions no estàndard de pressió i temperatura en la síntesi dels materials
- Cribatge per a escollir les reaccions catalítiques més adequades per als sistemes preparats
- Aplicació catalítica de les nanopartícules preparades: estudi cinètic i avaluació de l'eficiència catalítica

METODOLOGIA

Nanogotes d'un líquid suspeses en un altre líquid immiscible poden confinar espais en els quals pot ocórrer la cristallització de materials inorgànics. Aquesta estratègia pot utilitzar-se per a preparar nanopartícules oxídiques amb propietats catalítiques. En aquest treball, a més d'utilitzar aquesta tècnica, les nanoemulsions dels precursors seran sotmeses a condicions de pressió i temperatura no estàndards (condicions de síntesi hidrotèrmica).

La caracterització col·loidal dels sistemes es realitzarà mitjançant les tècniques analítiques adequades incloent-hi difusió de la llum dinàmica (DLS). La morfologia dels materials s'avaluarà mitjançant microscòpia electrònica d'escombratge (SEM) i de transmissió (TEM). S'utilitzaran les tècniques analítiques i espectroscòpiques escaients per a la determinació de la composició dels materials.

La cinètica de les reaccions catalítiques estudiades se seguirà per mitjà de cromatografia líquida d'alta resolució (HPLC) o de gasos (GC), segons convinga.

* només en el cas de que algun dels tutors no complisca els requisits per a ser tutor acadèmic



(segell del Departament)

TEMA TREBALL FI DE GRAU
 GRAU EN QUÍMICA

TUTOR/A ACADÈMIC/A: Rafael Muñoz-Espí i Amparo Cháfer Ortega (Enginyeria Química)

TUTOR/A del TREBALL (si escau)*: _____

TUTOR/A EXTERN/A (si escau): _____

TÍTOL

Diòxid de carboni supercrític com a dissolvent sostenible en la preparació de partícules a partir de sistemes emulsionats

OBJECTIUS

- Desenvolupament d'una estratègia de síntesi per a l'ús de CO₂ supercrític com a dissolvent en la preparació de nanopartícules polimèriques (o inorgàniques, si escau) mitjançant la tècnica de la miniemulsió.
- Cribatge per a seleccionar els sistemes d'estudi més adequats i amb més potencial des d'un punt de vista fonamental i aplicat
- Preparació de les nanopartícules i optimització dels paràmetres de síntesi

METODOLOGIA

El treball se centra en l'ús de CO₂ supercrític com a dissolvent per a sistemes que involucren miniemulsions, un cas especial d'emulsions cinèticament estabilitzades. Gotetes nanomètriques d'una fase que conté un monòmer orgànic o un precursor inorgànic es troben disperses en una fase contínua immiscible, que en aquest cas seria el CO₂. L'equipament per a la realització dels experiments amb fluids supercrítics es troba al Departament d'Enginyeria Química, a l'ETSE.

Una part important del treball és el cribatge i l'elecció dels sistemes més adequats per l'ús del CO₂ com a dissolvent. A més, es preveu una tasca important d'optimització de paràmetres. Un repte important en el desenvolupament del treball és que el dissolvent només es troba com a tal sota les condicions supercrítiques del reactor.

Una vegada caracteritzats els materials, si el temps disponible ho permet, s'avaluaran les possibilitats d'aplicació.

* només en el cas de què algun dels tutors no complisca els requisits per a ser tutor acadèmic



TEMA TREBALL FI DE GRAU
 GRAU EN QUÍMICA

TUTOR/A ACADÈMIC/A: Rafael Muñoz-Espí i Clara M. Gómez Clari

TUTOR/A del TREBALL (si escau)*:

TUTOR/A EXTERN/A (si escau):

TÍTOL

Desenvolupament de recobriments polimèrics per a l'emmagatzematge d'energia tèrmica

OBJECTIUS

- Optimització de la síntesi de nanocàpsules polimèriques per a l'encapsulació de materials de canvi de fase
- Caracterització col·loidal i estructural de les càpsules preparades
- Desenvolupament d'estratègies de preparació de pel·lícules i recobriments polimèrics a partir de les càpsules preparades
- Desenvolupament d'un dispositiu experimental que permeta avaluar l'eficiència dels materials finals.

METODOLOGIA

En aquest treball es prepararan càpsules polimèriques mitjançant la tècnica de la miniemulsió. Aquestes càpsules han d'incorporar els anomenats materials de canvi de fase (PCM), que són materials que emmagatzemen energia en forma de calor latent quan canvien de fase per un augment de la temperatura. Aquesta energia és alliberada quan baixa de nou la temperatura.

A partir de les càpsules polimèriques formades es formaran pel·lícules que continguen els PCM. La caracterització dels sistemes es realitzarà mitjançant les tècniques escaients, incloent-hi difusió de la llum dinàmica (DLS), la microscòpia electrònica d'escombratge (SEM) i de transmissió (TEM) i la calorimetria diferencial d'escombratge (DSC), entre d'altres.

Es pretèn desenvolupar un dispositiu que permeta estimar l'eficiència dels recobriments polimèrics després de diferents cicles de canvi de temperatura.

* només en el cas de que algun dels tutors no complisca els requisits per a ser tutor acadèmic



(segell del Departament)

TEMA TREBALL FI DE GRAU
 GRAU EN QUÍMICA

TUTOR/A ACADÈMIC/A: Rafael Muñoz-Espí i Clara M. Gómez Clari

TUTOR/A del TREBALL (si escau)*: _____

TUTOR/A EXTERN/A (si escau): _____

TÍTOL

Tèxtils per a l'emmagatzematge i la conversió d'energia

OBJECTIUS

OBJECTIU GENERAL: realització d'un dispositiu híbrid sobre un suport tèxtil que combine materials de canvi de fase (PCM) amb materials termoelèctrics.

OBJECTIUS ESPECÍFICS:

- Preparació de càpsules polimèriques que continguen PCM i avaluació de l'eficiència dels materials encapsulats.
- Deposició de les càpsules sintetitzades sobre tèxtils mitjançant la tècnica "capa a capa" ("layer by layer").
- Síntesi de teles termoelèctriques mitjançant electrodeposició, amb capacitat per a emmagatzemar energia tèrmica com a resultat de la presència dels PCM.

METODOLOGIA

En aquest treball es preparen sistemes híbrid basats en teles de feltre que combinen materials de canvi de fase (PCM), els quals emmagatzemen energia tèrmica quan canvia la temperatura, amb materials termoelèctrics, que poden produir energia elèctrica a partir d'un gradient de temperatura.

L'encapsulació dels PCM es durà a terme mitjançant la tècnica de la miniemulsió, basada en la formació de nanogotes d'una fase dispersa en una fase continua no miscible en la primera. A continuació, les càpsules es dipositaran sobre la tela de feltre mitjançant la tècnica "capa a capa" ("layer-by-layer"), la qual permet augmentar el nombre de capes dipositades mitjançant interaccions electrostàtiques intermoleculares. Finalment, la síntesi de teles termoelèctriques es realitzarà mitjançant electrodeposició sobre un suport tèxtil conductor.

La caracterització col·loidal dels sistemes es realitzarà mitjançant les tècniques analítiques oportunes, incloent-hi la dispersió dinàmica de la llum (DLS). La morfologia i la segregació dels materials finals s'avaluarà mitjançant microscòpia electrònica d'escombratge (SEM) i de transmissió (TEM). L'anàlisi de l'eficiència d'encapsulació es realitzarà mitjançant les tècniques espectroscòpiques o d'anàlisi elemental més oportunes. L'eficiència dels PCM s'avaluarà per mitjà de calorimetria diferencial d'escombratge (DSC). Finalment, l'eficiència de les teles termoelèctriques s'avaluarà a partir de mesures de conductivitat elèctrica i del coeficient Seebeck.

* només en el cas de que algun dels tutors no complisca els requisits per a ser tutor acadèmic



(segell del Departament)

**TEMA TREBALL FI DE GRAU
 GRAU EN QUÍMICA**

TUTOR/A ACADÈMIC/A: Javier Segarra-Martí y Mercedes Rubio

TUTOR/A del TREBALL (si escau)*: Daniel Roca-Sanjuán

TUTOR/A EXTERN/A (si escau):

TÍTOL

Caracterización espectroscópica de la melanina a través de modelos moleculares

OBJECTIUS

El proyecto pretende que el/la estudiante:

- Se inicie en el uso de métodos de cálculo de la química cuántica para el estado excitado, introducidos en el curso de química computacional, así como con la interpretación de sus resultados.
- Investigue la estructura nuclear y electrónica, y los caminos de desactivación tanto radiativa (emisión) como no radiativa (conversión interna) en el estado excitado de sistemas modelo que conforman la melanina.
- Se instruya en el análisis, estructuración y redacción de los resultados de la investigación.

METODOLOGIA

La melanina es el pigmento que protege nuestra piel contra la radiación de tipo ultravioleta proveniente del sol y que no es filtrada en la atmósfera, y cuyo daño se relaciona con el tipo de cancer de piel más frecuente llamado melanoma. A pesar de su importancia, la estructura de la melanina es desconocida debido a su naturaleza polimérica y su amplia diversidad a la hora de agregarse a través tanto de puentes de hidrógeno como por interacciones no covalentes, dificultando su caracterización. Este proyecto pretende estudiar las moléculas más pequeñas con las cuales se forma dicho polímero, 5,6-dihidroxi-indol (DHI) y 5,6-dihidroxi-indol-2-ácido carboxílico (DHICA), caracterizando sus propiedades electrónicas y espectroscópicas, a modo de entender cómo contribuyen a las señales espectroscópicas medidas experimentalmente en el polímero. Para ello se contemplan las siguientes etapas:

- 1) Búsqueda bibliográfica para identificar las señales espectroscópicas de la melanina.
- 2) Determinación de las propiedades electrónicas y espectroscópicas del DHI y DHICA a través del uso de la química cuántica y sus métodos multiconfiguracionales para el estado excitado (CASPT2).
- 3) Análisis de los resultados obtenidos para las diferentes moléculas estudiadas y comparativa con los resultados experimentales encontrados en la bibliografía.

* només en el cas de què algun dels tutors no complisca els requisits per a ser tutor acadèmic



TEMA TREBALL FI DE GRAU
 GRAU EN QUÍMICA

TUTOR/A ACADÈMIC/A: Javier Segarra-Martí y Mercedes Rubio

TUTOR/A del TREBALL (si escau)*: Daniel Roca-Sanjuán

TUTOR/A EXTERN/A (si escau):

TÍTOL

Estudio teórico de lesiones fotoinducidas en el ADN a través de la cicloadición de timinas

OBJECTIUS

El proyecto pretende que el/la estudiante:

- Se inicie en el uso de métodos de cálculo de la química cuántica para el estado excitado, introducidos en el curso de química computacional, así como con la interpretación de sus resultados.
- Investigue la estructura nuclear y electrónica, y los caminos de desactivación del estado excitado en reacciones que forman cicloadiciones [2+2] de Woodward-Hoffmann en dímeros de timina.
- Se instruya en el análisis, estructuración y redacción de los resultados de la investigación.

METODOLOGIA

Los cyclobutane pyrimidine dimers (CPDs, o dímeros pirimidínicos de ciclobutano) son un tipo de cicloadición iniciada tras la absorción de luz que se da en las bases pirimidínicas del ADN (citosina y timina) y que son consideradas como uno de los principales mecanismos de generación de lesiones en el ADN y por tanto uno de los primeros pasos para entender a nivel molecular enfermedades como el cancer de piel. El proyecto pretende estudiar los mecanismos de formación de CPDs en dímeros de timina y su caracterización espectroscópica a través de los siguientes pasos:

- 1) Búsqueda bibliográfica para identificar las propiedades nucleares y electrónicas de los CPDs de timina caracterizados anteriormente tanto teórica como experimentalmente.
- 2) Determinación de las propiedades electrónicas y espectroscópicas de CPDs a través del uso de la química cuántica y sus métodos multiconfiguracionales para el estado excitado (CASPT2).
- 3) Análisis de los resultados obtenidos y comparativa espectroscópica con los resultados experimentales encontrados en la bibliografía, a modo de proveer de una descripción atomística de dicha reacción fotoquímica.

* només en el cas de què algun dels tutors no complisca els requisits per a ser tutor acadèmic



TEMA TREBALL FI DE GRAU
 GRAU EN QUÍMICA

TUTOR/A ACADÈMIC/A: Rafael Muñoz-Espí i Francisco F. Pérez-Pla

TUTOR/A del TREBALL (si escau)*: _____

TUTOR/A EXTERN/A (si escau): _____

TÍTOL

Efecte ouzo com a estratègia sintètica per a la preparació de nanopartícules catalítiques

OBJECTIUS

- Elecció de sistemes adequats amb capacitat catalítica que puguen ser preparats en forma de nanopartícules mitjançant l'anomenat efecte ouzo (emulsificació espontània)
- Preparació de les nanopartícules i optimització dels paràmetres de síntesi
- Avaluació de la capacitat catalítica dels sistemes preparats

METODOLOGIA

L'efecte ouzo, anomenat així pel licor d'anís grec amb aquest nom, es produeix quan a una dissolució d'un compost en un dissolvent A s'afegeix un segon dissolvent B, miscible en A però no-dissolvent per al compost dissolt. Es produeix, doncs, una separació de fases i una emulsificació espontània, per mitjà de la qual el compost precipita en forma de nanogotes o nanopartícules. Aquesta estratègia s'ha utilitzat per a la preparació d'alguns tipus de nanopartícules.

En el treball es farà un cribatge i una elecció de nanopartícules amb capacitat catalítica que puguen preparar-se mitjançant aquest mètode. La caracterització col·loidal dels sistemes es realitzarà mitjançant les tècniques analítiques oportunes, incloent-hi la dispersió dinàmica de la llum (DLS). La morfologia i la segregació dels materials finals s'avaluarà mitjançant microscòpia electrònica d'escombratge (SEM) i de transmissió (TEM). S'utilitzaran les tècniques analítiques i espectroscòpiques escaients per a la determinació de la composició dels materials.

La cinètica de les reaccions catalítiques estudiades se seguirà per mitjà de cromatografia líquida d'alta resolució (HPLC) o de gasos (GC), segons convinga.

* només en el cas de que algun dels tutors no complisca els requisits per a ser tutor acadèmic



TEMA TREBALL FI DE GRAU
 GRAU EN QUÍMICA

TUTOR/A ACADÈMIC/A: M.Carmen Martínez Bisbal

TUTOR/A del TREBALL (si escau)*: _____

TUTOR/A EXTERN/A (si escau): _____

TÍTOL

Espectroscòpia de RMN en fluids de interès biomèdic

OBJECTIUS

Determinación mediante espectroscòpia de resonancia magnètica nuclear (RMN) 1D y 2D de las sustancias presentes en fluids de interès biomèdic
 Comparación de los resultados en un grupo control y en pacientes

METODOLOGIA

Sobre espectros 1D de protón con supresión de la seña de agua se realizará la asignación de las señaes presentes en función del desplazamiento químico, la multiplicidad y el acoplamiento J. Se consultará la bibliografía publicada sobre el tema y las bases de datos de metabólica. Por otra parte, se realizará la simulación de espectros de RMN para comparar las señaes teóricas de las moléculas con las encontradas en las condiciones fisiológicas en mezclas complejas, y los espectros de disoluciones de dichas sustancias. Los espectros 2D homo y/o heteronucleares se interpretarán para complementar la asignación de aquellas resonancias solapadas en los espectros 1D y para asignar los sistemas de spín de las moléculas con diferentes tipos de protones. Una vez identificadas las principales resonancias se realizará una cuantificación de los espectros para realizar una comparación de medias y estudio estadístico multivariante para distinguir los pacientes del grupo control y determinar el potencial de esta estrategia como herramienta de apoyo al diagnóstico.

* només en el cas de que algun dels tutors no complisca els requisits per a ser tutor acadèmic



(segell del Departament)

TEMA TREBALL FI DE GRAU
GRAU EN QUÍMICA

TUTOR/A ACADÈMIC/A: Lourdes Gracia Edo

TUTOR/A del TREBALL (si escau)*: _____

TUTOR/A EXTERN/A (si escau): _____

TÍTOL

Estudio teórico de la catálisis por agua de la reacción de NH_3 con el catión MO^+

OBJECTIUS

Estudio teórico de la reacción de NH_3 con MO^+ siendo M un metal de transición (V, Nb), concretamente la inserción en fase gas de MO^+ en el enlace N-H del amoniaco.
Estudio de la interacción de una molécula de agua con un H del grupo amino o con el V de la molécula $\text{VO}(\text{NH}_3)^+$.
Análisis del mecanismo de actuación del agua, como dador y aceptor de protones, caracterizando las estructuras de transición cíclicas que intervienen.

METODOLOGIA

La reactividad química en fase gaseosa de los metales de transición y sus óxidos y, en particular, la interacción con el agua ha recibido considerable atención debido a su importancia en la catálisis de oxidación.
Se utilizará el programa GAUSSIAN para optimizar todos los puntos estacionarios y para realizar los análisis vibracionales correspondientes. Se realizarán cálculos basados en la teoría del funcional de la densidad (DFT) utilizando adecuados funcionales y conjuntos de bases para describir los átomos.
El método de la coordenada de reacción intrínseca se llevará a cabo para describir los caminos de mínima energía que conectan las estructuras de transición con los mínimos correspondientes.

* només en el cas de què algun dels tutors no complisca els requisits per a ser tutor acadèmic



TEMA TREBALL FI DE GRAU
 GRAU EN QUÍMICA

TUTOR/A ACADÈMIC/A: M.Carmen Martínez Bisbal

TUTOR/A del TREBALL (si escau)*: _____

TUTOR/A EXTERN/A (si escau): _____

TÍTOL

Estudios fluidos de interés biomédico mediante Espectroscopía de RMN

OBJECTIUS

Determinación mediante espectroscopía de resonancia magnética nuclear (RMN) 1D y 2D de las sustancias presentes en fluidos de interés biomédico
 Comparación de los resultados en un grupo control y en un grupo patológico

METODOLOGIA

Sobre espectros 1D de protón con supresión de la señal de agua se realizará la asignación de las señales presentes en función del desplazamiento químico, la multiplicidad y el acoplamiento J. Se consultará la bibliografía publicada sobre el tema y las bases de datos de metabolómica. Por otra parte, se realizará la simulación de espectros de RMN para comparar las señales teóricas de las moléculas con las encontradas en las condiciones fisiológicas en mezclas complejas, y los espectros de disoluciones de dichas sustancias. Los espectros 2D homo y/o heteronucleares se interpretarán para complementar la asignación de aquellas resonancias solapadas en los espectros 1D y para asignar los sistemas de spín de las moléculas con diferentes tipos de protones. Una vez identificadas las principales resonancias se realizará una cuantificación de los espectros para realizar una comparación de medias y estudio estadístico multivariante para distinguir los pacientes del grupo control y determinar el potencial de esta estrategia como herramienta de apoyo al diagnóstico.

* només en el cas de que algun dels tutors no complisca els requisits per a ser tutor acadèmic



**TEMA TREBALL FI DE GRAU
 GRAU EN QUÍMICA**

Inmaculada García Cuesta y Alfredo Sánchez de Merás

TUTOR/A ACADÈMIC/A: _____

TUTOR/A del TREBALL (si escau)*: _____

TUTOR/A EXTERN/A (si escau): _____

TÍTOL

Caracterización y propiedades magnéticas del complejo de inclusión C70@[3]CPP4A.

OBJECTIUS

Estudio mediante el uso de métodos químico-cuánticos del complejo de inclusión formado por la unión de un fullereno con un anillo grande de cicloparafenilenacetileno. Caracterización de su estructura, estabilidad y respuesta a la perturbación causada por campos magnéticos y eléctricos.

METODOLOGIA

El estudio se realizará haciendo uso de métodos mecanocuánticos, fundamentalmente DFT, para la determinación de estructuras y estabilidad. Las propiedades se determinarán mediante el formalismo de las funciones de respuesta.

* només en el cas de què algun dels tutors no complisca els requisits per a ser tutor acadèmic

