

TFG EN EMPRESA (Grupo de matrícula EM)

NÚMERO	TEMA	TUTOR(S) ACADÈMIC(S)	TUTOR EXTERN (si escau)	EMPRESA
1	Métodos computacionales para el descubrimiento y la optimización de compuestos terapéuticos		Laureano Carpio Mulas	ProtoQSAR
2	Diseño, síntesis, procesado y caracterización de materiales poliméricos para aplicaciones energéticas		Sergio Navarro/Laura Martí	AIMPLAS
3	Identificación de biomarcadores para el diagnóstico de enfermedades mediante datos ómicos		Martina Palomino Schätzlein	ProtoQSAR
4	Creación de modelos de predicción in silico de (eco)toxicidad e incorporación en una plataforma web		Martina Palomino Schätzlein	ProtoQSAR
5	Aplicación de técnicas computacionales en la evaluación de la seguridad y sostenibilidad de nuevos productos durante su desarrollo		José Luis Vallés	ProtoQSAR
6	Diseño de emulsiones bituminosas para mezclas asfálticas en frío alternativas		José Ramón López Marco	PAVASAL
7	Degradación de insecticidas aplicados en superficies alcalinas: evaluación química y biológica		Ignacio Gil Torró	INESFLY
8	Medición de Plasticidad en Materiales Arcillosos		José Enrique Clar Palomares	TORRECID

TRABAJO FINAL DE GRADO
GRADO EN QUÍMICA

TUTOR/A ACADÉMICO/A: _____

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

TUTOR/A EXTERNO/A (si procede): Laureano Carpio Mulas

Departamento: _____

TÍTULO

Métodos computacionales para el descubrimiento y la optimización de compuestos terapéuticos.

OBJETIVOS

El objetivo es el desarrollo y la aplicación de diferentes métodos computacionales (Q)SAR y Molecular modeling, enfocados a descubrir moléculas con propiedades terapéuticas contra dianas moleculares, como ERK, MRGPRX2..., involucradas en diferentes patologías.

METODOLOGÍA

Los objetivos de estas prácticas son: (i) complementar y poner en práctica los conocimientos adquiridos durante los estudios (ii) Conocer el funcionamiento de la empresa (iii) Adquirir habilidades, conocimientos y destrezas para el ejercicio profesional (iv) mejorar la posibilidad de empleo.

Para ello, el estudiante realizará diversas actividades como: (i) Revisión bibliográfica de trabajos científicos para la obtención de datos de biológicos, (ii) elaboración y tratamiento de bases de datos, (iii) utilización de diferentes técnicas computacionales para el descubrimiento de nuevas moléculas y (iv) caracterización del perfil toxicológico de las nuevas moléculas.

TRABAJO FINAL DE GRADO
GRADO EN QUÍMICA

TUTOR/A ACADÉMICO/A: _____

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

TUTOR/A EXTERNO/A (si procede): Sergio Navarro/Laura Martí

Departamento: Construcción y Energías renovables/ Descarbonización

TÍTULO

Diseño, síntesis, procesado y caracterización de materiales poliméricos para aplicaciones energéticas

OBJETIVOS

Los objetivos específicos a desarrollar durante la ejecución de Trabajo serán los siguientes:

1. Conocer los retos a los que se enfrenta la Industria en relación a la generación y almacenamiento de energía empleando materiales poliméricos.
2. Diseñar y sintetizar materiales poliméricos de tipo redox para almacenamiento.
3. Obtener electrolitos sólidos para almacenamiento.
4. Evaluación de las propiedades de los materiales sintetizados.
5. Estudio de aplicabilidad.

METODOLOGÍA

La metodología seguida para llevar a cabo el Trabajo implicará:

1. Búsqueda bibliográfica de información en bases de datos científicas de modo que se identifiquen los retos, ventajas y métodos sintéticos más adecuados para la obtención de materiales poliméricos empleados en almacenamiento de energía.
2. Aplicar la metodología científica en la preparación y ejecución del Trabajo.
3. Selección de materiales y proveedores necesarios para llevar a cabo la síntesis y procesado de los mismos, evaluando el impacto de los costes de dichos materiales y disponibilidad para su futura aplicación en el mercado.
4. Síntesis de electrolitos de estado sólido y materiales poliméricos empleando reactores y técnicas de síntesis en condiciones inertes, y/o bajo presión. Se propondrán alternativas a las etapas inicialmente planteadas y buscarán soluciones adecuadas en base a los objetivos planteados, analizando el impacto sobre el coste y aplicabilidad.
5. Procesado de los materiales poliméricos mediante técnicas de extrusión, compounding y/o inyección.
6. Adquirir capacidades técnicas en caracterización (FTIR, TGA, reología, medidas de adsorción, RMN, conductividad, permeabilidad,).
7. Elaboración de informes científicos y presentaciones en los que se discutan los resultados encontrados en base a la caracterización de los materiales

TRABAJO FINAL DE GRADO
GRADO EN QUÍMICA

TUTOR/A ACADÉMICO/A: _____

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

TUTOR/A EXTERNO/A (si procede): Martina Palomino Sch tzlein

Departamento: Química

TÍTULO

Identificación de biomarcadores para el diagnóstico de enfermedades mediante datos microscópicos

OBJETIVOS

El principal objetivo de este TFG es el análisis de datos microscópicos para identificar una serie de biomarcadores que puedan proporcionar información acerca del diagnóstico, evolución o eficacia del tratamiento de una enfermedad. Los resultados también se aplican para la identificación de rutas metabólicas alteradas como fuente de información acerca del posible mecanismo de la enfermedad.

METODOLOGÍA

El proyecto se enmarca en el ámbito de la bioinformática y por lo tanto las metodologías que se utilizarán son de carácter computacional. Concretamente, se aplicarán las siguientes técnicas:

- El procesamiento de tablas de datos microscópicos
- La generación de modelos predictivos aplicando técnicas de aprendizaje automático usando diferentes algoritmos (PLS, regresión logística, análisis lineal discriminante, bosques aleatorios, etc).
- La identificación de metabolitos o genes relevantes, y las rutas alteradas asociadas
- La elaboración de diferentes tipos de gráficos para la representación de los resultados

TRABAJO FINAL DE GRADO
GRADO EN QUÍMICA

TUTOR/A ACADÉMICO/A: _____

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

TUTOR/A EXTERNO/A (si procede): Martina Palomino Sch tzlein

Departamento: Química

TÍTULO

Creación de modelos de predicción in silico de (eco)toxicidad y incorporación en una plataforma web

OBJETIVOS

El principal objetivo de este TFG es generar modelos computacionales para la predicción de propiedades tóxicas de compuestos químicos, como alternativa a los ensayos experimentales con animales. Los modelos generados serán incorporados en una aplicación web para facilitar su uso a los científicos, la industria y las agencias reguladoras.

METODOLOGÍA

El proyecto se enmarca en el ámbito de la quimioinformática y por lo tanto las metodologías que se utilizarán serán de carácter computacional. Concretamente, se aplicarán las siguientes técnicas:

- El manejo bases de datos de compuestos químicos desde librerías específicas (Pubchem, Iris, OCHEM, ChemBL, EPA, CCRIS, CPDB) o extrayendo de los recursos en línea vía web (web-scraping).
- El procesamiento de datos mediante scripts de Python propios o ya existentes.
- La generación de modelos QSAR aplicando técnicas de aprendizaje automático usando diferentes algoritmos (Regresión logística, análisis discriminante, bosques aleatorios, etc).
- La valoración de la calidad de los modelos generados mediante el cálculo de métricas estándar como la sensibilidad, la especificidad, la precisión y la exactitud.
- La implementación de los modelos generados en una plataforma web ya existente (<https://protopred.protoqsar.com/>)

TRABAJO FINAL DE GRADO
 GRADO EN QUÍMICA

TUTOR/A ACADÉMICO/A: _____

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

TUTOR/A EXTERNO/A (si procede): Josè Luis Vallès

Departamento:

TÍTULO

Aplicación de técnicas computacionales en la evaluación de la seguridad y sostenibilidad de nuevos productos durante su desarrollo.

OBJETIVOS

El principal objetivo de este TFG es aplicar y evaluar el uso de técnicas computacionales para evaluar la seguridad y la sostenibilidad de nuevos materiales o productos químicos en la fase de desarrollo, es decir previamente a su fabricación. Concretamente, el trabajo tiene los siguientes objetivos específicos:

- Evaluación bibliográfica de los recursos disponibles, de la reglamentación aplicable y de las propuestas incluidas en la literatura y en proyectos similares
- Compilación automatizada de información proveniente de bases de datos, mediante el uso de APIs y scripts.
- Uso de modelos de predicción quimioinformáticos (como QSAR o read across) para predecir la (eco)toxicidad y otras propiedades relevantes de los compuestos de interés. Evaluación de la idoneidad y calidad de los métodos predictivos disponibles.

METODOLOGÍA

El proyecto se enmarca en el ámbito de la quimioinformática y por lo tanto las metodologías que se utilizarán son de carácter computacional. El estudiante desarrollará sus habilidades de programación en Python, ya sea para crear sus propios scripts o para utilizar/modificar los programas que se le proporcionarán.

El manejo de las bases de datos, tanto de la interna del proyecto como de las bases externas consultadas, se hará principalmente a través de scripts Python, usando tanto librerías específicas para la lectura de bases de datos (APIs) como otras que extraen la información de los recursos en línea vía web (web-scraping).

Las predicciones se harán utilizando métodos de aprendizaje automático (Machine-Learning) basados en datos químicos y en descriptores moleculares tales como QSAR y read-across. El trabajo incluirá el uso y evaluación estadística de modelos propios de la empresa, así como otros disponibles en herramientas externas. El trabajo puede incluir el desarrollo o refinamiento de los modelos de predicción.

TEMA TREBALL FI DE GRAU
GRAU EN QUÍMICA

TUTOR/A ACADÈMIC/A: _____

TUTOR/A ACADÈMIC/A (si escau): _____

TUTOR/A EXTERN/A (si escau): José Ramón López Marco (PAVASAL)

Departament: I+D

TÍTOL

DISEÑO DE EMULSIONES BITUMINOSAS PARA MEZCLAS ASFÁLTICAS EN FRÍO ALTERNATIVAS

OBJECTIUS

El objetivo del trabajo es el desarrollo de nuevas emulsiones bituminosas para la creación de un conjunto de nuevas mezclas en frío que pretenden solucionar carencias y problemáticas que actualmente no pueden ser atendidas de manera efectiva. Durante el presente trabajo se utilizará una planta piloto de fabricación de emulsiones con el fin de desarrollar emulsiones a escala laboratorio para posteriormente realizar el escalado a entorno industrial.

METODOLOGIA

La idea es diseñar varias tipologías de emulsiones:

1- En primer lugar, se realizará una actualización y rediseño de las emulsiones existentes actualmente en la empresa. Actualizando y probando nuevos componentes y reevaluando sus propiedades de forma comparativa con los productos existentes: generalmente emulsiones de imprimación y adherencia (prestando especial interés a las emulsiones termoaderentes), esto permitirá una toma de contacto inicial con las tareas de cara a poder abordar posteriormente el diseño de nuevas emulsiones.

2- Diseño de emulsiones bituminosas destinadas a su utilización en la fabricación de nuevos materiales con alta tasa de asfalto reciclado (RA), generados in situ a temperatura ambiente. Este tipo de emulsiones tiene un especial interés y a la vez dificultad ya que deben incorporarse aditivos especiales que permitan el rejuvenecimiento del RA. El empleo de RA tendrá un importante impacto en la sostenibilidad en tareas de conservación de firmes.

3- El último grupo de emulsiones a diseñar es el más novedoso y que no existe actualmente en el mercado nacional. Por lo que, requerirá de una mayor carga de investigación para lograr emulsionar betunes sintéticos. Estos betunes están formados por polímeros y permiten ser coloreados (no presentan una tonalidad negra). Para poder emulsionarlos habrá que hacer un estudio más exhaustivo de los emulgentes y aditivos a utilizar. La idea final es conseguir emulsiones que presenten la posibilidad de ser pigmentables para dos funciones principales:

- Emulsiones sintéticas que actúen como adherencia entre capas. Esto permitirá su uso en aquellas obras en las que actualmente se utilizan mezclas de color. Estas emulsiones deben de presentar una rotura relativamente rápida para esta aplicación, puesto que deben ser transitables al poco tiempo de su aplicación, serán emulsiones que deben cumplir con especificaciones semejantes a las utilizadas actualmente con betún negro.

- La segunda tipología de emulsiones debe presentar una rotura más lenta para que permitan la fabricación de aglomerados en frío que puedan ser pigmentables. El reto en este caso es el mismo, encontrar los aditivos adecuados, emulsionantes y fluxantes que sean equivalentes a los utilizados en la fabricación normal de emulsiones de betún.

Implícito en los trabajos de diseño anteriores está la comprobación de que las emulsiones propuestas cumplen con la normativa que aplica en cada caso. Por lo que se deberán realizar los ensayos de comprobación pertinentes.

Por último, una vez concluida con la etapa inicial de diseño de emulsiones, el siguiente paso será comprobar que las emulsiones presentan una buena actuación en servicio, en especial para aquellas emulsiones como las utilizadas en el reciclado in situ o las utilizadas para la fabricación de "aglomerados en frío" (temperatura ambiente) que, deben conferir a los productos unas ciertas características. La evaluación de estas características requerirá de la realización de los ensayos de control necesarios para cada tipo de mezcla bituminosa.

Entre ellos, un aspecto relevante es como conseguir la pigmentación posterior de la emulsión a la tonalidad requerida para cada caso, sin afectar a su rotura, para ello se puede enfocar el problema desde dos vías: bien por la adición de algún tipo de pigmento en formato líquido, para evitar la rotura prematura de la emulsión, o bien con la utilización directa de áridos con la coloración deseada. Por tanto, la búsqueda de los materiales de partida para el diseño y la caracterización de los mismos va a suponer una parte importante de esta investigación.

En general, para cada tipo de emulsión el proceso será iterativo: procediendo en un primer paso al diseño, después a la comprobación de las propiedades de la emulsión y por último a la evaluación de la aplicabilidad y las prestaciones que confiere al producto en frío en el que se utiliza, volviendo al inicio si en algún punto del proceso no se ha conseguido el objetivo deseado.

JOSE RAMON
LOPEZ
MARCO - NIF.
20148701B

Firmado digitalmente por JOSE RAMON
LOPEZ MARCO - NIF:20148701B
DN: cn=JOSE RAMON LOPEZ MARCO -
NIF:20148701B,
SERIALNUMBER=20148701B, G=JOSE
RAMON, SN=LOPEZ MARCO,
OU=CIUDADANOS, O=ACCIO, C=ES
Razón: Soy el autor de este documento
Ubicación: la ubicación de su firma aquí
Fecha: 2023.07.11 17:39:33+02'00'
Foxit PhantomPDF Versión: 10.1.0



(segell del Departament)

TRABAJO FINAL DE GRADO
GRADO EN QUÍMICA

TUTOR/A ACADÉMICO/A: _____

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

TUTOR/A EXTERNO/A (si procede): Ignacio Gil Torró

TÍTULO

Degradación de insecticidas aplicados en superficies alcalinas: evaluación química y biológica

OBJETIVOS

1. Investigar sobre la extensión y cinética de la degradación de los compuestos clorfenapir y pirimifos-metil derivada de su contacto con cemento.
2. Desarrollar mejoras en las formulaciones actuales de clorfenapir y pirimifos-metil para limitar el efecto degradante del cemento
3. Evaluar la eficacia residual de las formulaciones desarrolladas frente a mosquitos
4. Desarrollar metodologías de evaluación de la degradación de insecticidas aplicados en superficies

METODOLOGÍA

Preparación de formulaciones de pinturas insecticidas conteniendo clorfenapir y pirimifos-metil que serán sometidas a degradación por cemento con diferentes tiempos de contacto, tanto en húmedo como en seco.

Análisis por cromatografía gaseosa de la concentración de los compuestos para medir la intensidad de la degradación.

Realización de ensayos de eficacia con mosquitos para evaluar la velocidad de pérdida del efecto insecticida con el tiempo derivada de la degradación por el cemento.



Camino de la Pascualeta, 5
46200 PAIPORTA
(Valencia) ESPAÑA
Tel.: +34 963 974 492
Fax: +34 963 974 495



(Sello del Departamento)

TEMA TREBALL FI DE GRAU
GRAU EN QUÍMICA

TUTOR/A ACADÈMIC/A: _____

TUTOR/A ACADÈMIC/A (si escau): _____

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

Departament:

TITLE

OBJECTIUS / OBJECTIVES / OBJETIVOS (Choose the language)

METODOLOGIA / METHODOLOGY / METODOLOGÍA (Choose the language)