

TEMAS PENDIENTES DE INSCRIBIR

DEPARTAMENTO DE QUÍMICA FÍSICA

NÚMERO	TEMA	TUTOR(S) ACADÈMIC(S)	TUTOR EXTERN (si es)
2	Influencia del método de síntesis en la actividad catalítica de nanopartículas de Ag depositadas sobre partículas de óxidos metálicos recubiertas con polidopamina frente a la reducción de nitroarenos.	Francisco F. Pérez Pla / M ^a Angeles Úbeda Picot	
3	Complejos de Ir(III) con ligandos de tipo carbeno: una prometedora posibilidad para dispositivos electroluminiscentes	Enrique Orti Guillem/ Angelo Giussani	
8	DISEÑO IN SILICO DE NUEVAS MOLECULAS BIOLÓGICAMENTE ACTIVAS POR TOPOLOGÍA MOLECULAR	Ramón García Domench / Riccardo Zanni	
11	Estudio del efecto termoeléctrico en membranas iónicas e hidrogeles sintetizados a partir de residuos de biomasa lignocelulósica.	Mario Culebras Rubio	
12	Fabricación de módulos termoeléctricos utilizando materiales híbridos multicapa de alta eficiencia	Mario Culebras Rubio	
13	Síntesis de nanopartículas conductoras híbridas para la recuperación y almacenamiento de energía.	Mario Culebras Rubio	
14	Síntesis de nanoestructuras de carbono a partir de materias primas sostenibles para recuperación y almacenamiento de energía.	Mario Culebras Rubio	
18	Depósito de poli(azul de metileno) sobre electrodos de acero.	José Juan García Jareño / Jerónimo Agrisuelas Vallés	
19	Depósito de poli(rojo neutro) sobre electrodos de acero.	José Juan García Jareño / Jerónimo Agrisuelas Vallés	
20	Estudio de la corrosión de latón por técnicas electroquímicas y video digital.	José Juan García Jareño / Jerónimo Agrisuelas Vallés	
21	SÍNTESIS IN-SITU DE POLITIOFENO EN UNA MATRIZ DE POLIURETANO	Clara M.Gómez Clari	
23	Moléculas MOST (Molecular Solar Thermal Storage): la idea, los resultados y las perspectivas futuras de una tecnología para almacenar energía solar a nivel molecular.	Angelo Giussani / Begoña Milian Medina	
28	Funcionalització de nanopartícules polimèriques amb lligands metal·locomplexants	Rafael Muñoz Espi / María González-Bejar	
39	Separación de contribuciones de corto y largo rango en cálculos químico-cuánticos.	Alfredo M.J. Sánchez de Merás	
40	Estudio teórico de propiedades magnéticas en sistemas aromáticos policíclicos. Efectos de las corriente de anillo sobre los apantallamientos nucleares magnéticos.	Inmaculada García Cuesta	
	Modelado de la actividad biológica mediante la topología molecular: aplicación a la predicción de toxicidad	Jesús Vicente de Julián Ortiz	

TRABAJO FINAL DE GRADO
 GRADO EN QUÍMICA

TUTOR/A ACADÉMICO/A: Francisco F. Pérez Pla

TUTOR/A ACADÉMICO/A (si procede): M. Ángeles Úbeda Picot

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

TÍTULO

Influencia del método de síntesis en la actividad catalítica de nanopartículas de Ag depositadas sobre partículas de óxidos metálicos recubiertas con polidopamina frente a la reducción de nitroarenos.

OBJETIVOS

- Síntesis de partículas de óxidos metálicos y su recubrimiento con polidopamina (PDA).
- Deposición de nanopartículas de Ag sobre la superficie de la PDA mediante diversas técnicas sintéticas.
- Caracterización estructural de los materiales sintetizados.
- Determinación de la actividad catalítica de los materiales sintetizados frente a la reducción de nitroarenos.

METODOLOGÍA

- (1) Síntesis de materiales: técnicas estándar de síntesis. Utilización de líneas anaeróbicas.
- (2) Caracterización de materiales: Determinación del área específica y porosidad del material a partir de la isoterma de adsorción de N₂. Determinación termogravimétrica de la masa de PDA. Determinación del tamaño de las partículas del material dispersado en el reactor por DLS. Determinación de la dispersión superficial y composición relativa de las nanopartículas de Ag mediante EDX SEM. Determinación del tamaño y estructura de las nanopartículas metálicas mediante HRTEM.
- (3) Determinación de la actividad catalítica: Seguimiento de la reacción por HPLC y espectrofotometría DA UV-vis. Realización de experimentos de reciclabilidad del catalizador.



TRABAJO FINAL DE GRADO
 GRADO EN QUÍMICA

TUTOR/A ACADÉMICO/A: Enrique Ortí Guillén

TUTOR/A ACADÉMICO/A (si procede): Angelo Giussani

TUTOR/A EXTERNO/A (si procede):

TÍTULO

Complejos de Ir(III) con ligandos de tipo carbeno: una prometedora posibilidad para dispositivos electroluminiscentes

OBJETIVOS

El proyecto propuesto pretende:

- Iniciar al estudiante en el uso de los métodos y programas de cálculo de la química cuántica y familiarizarlo con la interpretación de los resultados mediante interfases gráficas.
- Estudiar la estructura electrónica y las propiedades fotofísicas de complejos iónicos de metales de transición utilizados como componentes electroactivos en dispositivos electroluminiscentes.
- Caracterizar las propiedades de los complejos en estado excitado.

METODOLOGÍA

Los complejos iónicos de Ir(III) se utilizan como materiales electroluminiscentes en dispositivos emisores de luz, transformando la energía eléctrica en energía luminosa. La incorporación de ligandos de tipo carbeno ha surgido recientemente como una prometedora estrategia para desplazar la emisión hacia el azul.

El proyecto pretende caracterizar los efectos de los ligandos de tipo carbeno sobre las propiedades estructurales, energéticas y fotofísicas del estado triplete emisor, lo cual conllevará:

- 1) Búsqueda bibliográfica: propiedades fotofísicas de los complejos de Ir(III).
- 2) Determinación de las propiedades estructurales y electrónicas de complejos de referencia de Ir(III) que incorporan unidades de tipo carbeno, en estado fundamental y en el estado triplete emisor, utilizando programas y métodos químico-cuánticos.
- 3) Análisis comparativo de los resultados obtenidos mediante interfases gráficas y correlación con los datos estructurales y espectroscópicos disponibles en la literatura.
- 4) Redacción de resultados.



(Sello del Departamento)

TEMA TREBALL FI DE GRAU
GRAU EN QUÍMICA

TUTOR/A ACADÈMIC/A: Ramón García Domenech

TUTOR/A ACADÈMIC/A (si escau): Riccardo Zanni

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

TÍTOL

DISEÑO IN SILICO DE NUEVAS MOLECULAS BIOLÓGICAMENTE 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).



(segell del Departament)

TRABAJO FINAL DE GRADO
GRADO EN QUÍMICA

TUTOR/A ACADÉMICO/A: Mario Culebras Rubio

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

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

TÍTULO

Estudio del efecto termoeléctrico en membranas iónicas e hidrogeles sintetizados a partir de residuos de biomasa lignocelulósica.

OBJETIVOS

Obtención de hidrogeles y membranas en base a lignina otras fracciones de biomasa con poco valor añadido. Modificación química superficial para mejorar el transporte iónico a través de las membranas. Caracterización estructural, morfológica y cálculo valor de eficiencia termoeléctrica mediante la medida del efecto Seebeck (iónico), la conductividad térmica y eléctrica.

METODOLOGÍA

La metodología a utilizar implicará:

1. El empleo de rutas sintéticas para producir hidrogeles a partir de fracciones de biomasa lignocelulósica (lignina y celulosa).
2. Producción de membranas porosas mediante liofilización de hidrogeles y optimización de las condiciones.
3. Manejo de técnicas de caracterización de transporte eléctrico como conductividad eléctrica, efecto Seebeck.
4. Análisis térmico mediante calorimetría diferencial de barrido modulada y termogravimetría.
5. Análisis morfológico mediante microscopía electrónica de barrido y transmisión.
6. Análisis estructural mediante FTIR, Raman y XPS.



(Sello del Departamento)

TRABAJO FINAL DE GRADO
 GRADO EN QUÍMICA

TUTOR/A ACADÉMICO/A: Mario Culebras Rubio

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

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

TÍTULO

Fabricación de módulos termoeléctricos utilizando materiales híbridos multicapa de alta eficiencia

OBJETIVOS

Obtención de materiales multicapa producidos por el método de "layer-by-layer" donde se combinan diferentes materiales nanoestructurados (nanopartículas de Poli (3,4-etilendioxitiofeno) y nanotubos de carbono. Fabricación de un generador termoeléctrico y su caracterización.

METODOLOGÍA

La metodología a utilizar implicará:

1. El uso de métodos para preparar suspensiones estables de nanotubos de carbono con diferente carga superficial.
2. Manejo del sistema automatizado de "layer-by-layer" propiedad del grupo de investigación .
3. Manejo de técnicas de caracterización de transporte eléctrico como conductividad eléctrica, efecto Seebeck, medida de efecto hall.
4. Análisis morfológico mediante microscopía electrónica de barrido y transmisión.
5. Medida de la potencia del generador fabricado en función del gradiente térmico aplicado.



(Sello del Departamento)

TRABAJO FINAL DE GRADO
 GRADO EN QUÍMICA

TUTOR/A ACADÉMICO/A: Mario Culebras Rubio

TUTOR/A ACADÉMICO/A (si procede):

TUTOR/A EXTERNO/A (si procede):

TÍTULO

Síntesis de nanopartículas conductoras híbridas para la recuperación y almacenamiento de energía.

OBJETIVOS

Producción de suspensiones de nanopartículas de Poli(3,4-etilendioxitiofeno) con diferentes cargas metálicas. Caracterización estructural, morfológica, electroquímica y cálculo valor de eficiencia termoeléctrica mediante la medida del efecto Seebeck, la conductividad térmica y eléctrica y mediada de la capacidad de carga eléctrica

METODOLOGÍA

La metodología a utilizar implicará:

1. El empleo de rutas sintéticas para producir nanopartículas de polímeros conductores utilizando métodos coloidales que permitan la generación de cargas inorgánicas insitu.
2. Manejo de técnicas de caracterización de transporte eléctrico como conductividad eléctrica y efecto Seebeck.
3. Análisis térmico mediante calorimetría diferencial de barrido modulada y termogravimetría.
4. Análisis morfológico mediante microscopía electrónica de barrido y transmisión.
5. Análisis estructural mediante FTIR, Raman, XRD y XPS.



(Sello del Departamento)

TRABAJO FINAL DE GRADO
 GRADO EN QUÍMICA

TUTOR/A ACADÉMICO/A: Mario Culebras Rubio

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

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

TÍTULO

Síntesis de nanoestructuras de carbono a partir de materias primas sostenibles para recuperación y almacenamiento de energía.

OBJETIVOS

Explorar nuevas rutas sintéticas que permitan producir nanoestructuras de carbono (nanopartículas, heteroestructuras y nanofibras) a partir de lignina. Optimización de las condiciones experimentales para controlar el grado de porosidad del material final. Realizar una caracterización completa de sus propiedades eléctricas, térmicas y estructurales.

METODOLOGÍA

La metodología a utilizar implicará:

1. El uso de técnicas de nanoestructuración de materiales basadas en "hard and soft template".
2. Carbonización en atmósfera controlada.
3. Análisis térmico mediante calorimetría diferencial de barrido modulada y termogravimetría de los precursores de carbono.
4. Medida de las propiedades eléctricas.
5. Análisis morfológico mediante microscopía electrónica de barrido y transmisión.



(Sello del Departamento)

TEMA TREBALL FI DE GRAU
 GRAU EN QUÍMICA

TUTOR/A ACADÈMIC/A: José Juan García Jareño

TUTOR/A ACADÈMIC/A (si escau): Jerónimo Agrisuelas Vallés

TUTOR/A EXTERN/A (si escau):

TÍTOL

Depósito de poli(azul de metileno) sobre electrodos de acero.

OBJECTIUS

Preparación de electrodos para el electrodeposito.
 Polimerizar poli(azul de metileno) sobre electrodos de acero.
 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.



(segell del Departament)

TEMA TREBALL FI DE GRAU
GRAU EN QUÍMICA

TUTOR/A ACADÈMIC/A: José Juan García Jareño

TUTOR/A ACADÈMIC/A (si escau): Jerónimo Agrisuelas Vallés

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

TÍTOL

Depósito de poli(rojo neutro) sobre electrodos de acero.

OBJECTIUS

Preparación de electrodos para el electrodepósito.
Polimerizar poli(rojo neutro) sobre electrodos de acero.
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.



(segell del Departament)

TEMA TREBALL FI DE GRAU GRAU EN QUÍMICA

TUTOR/A ACADÈMIC/A: José Juan García Jareño

TUTOR/A ACADÈMIC/A (si escau): Jerónimo Agrisuelas Vallés

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

TÍTOL

Estudio de la corrosión de latón por técnicas electroquímicas y video digital.

OBJECTIUS

Preparación de electrodos de latón.
Estudiar la corrosión de latón por curvas de polarización e impedancia electroquímica en distintos medios.
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.



(segell del Departament)

TEMA TREBALL FI DE GRAU
 GRAU EN QUÍMICA

TUTOR/A ACADÈMIC/A: CLARA M GÓMEZ CLARI

TUTOR/A ACADÈMIC/A (si escau):

TUTOR/A EXTERN/A (si escau):

TÍTOL

SÍNTESIS IN-SITU DE POLITIOFENOEN UNA MATRIZ DE POLIURETANO

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. obtención de películas flexibles de un polímero conductor en una matriz termo plástica de poliuretano 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 conductora,morfología, térmicas 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 nanoparticulas se encuentren bien dispersas. Una vez obtenidas las películas tendrá que determinar la conductividad eléctrica, el efecto Seebeck y su morfología.



(segell del Departament)

TRABAJO FINAL DE GRADO
 GRADO EN QUÍMICA

TUTOR/A ACADÉMICO/A: Angelo Giussani

TUTOR/A ACADÉMICO/A (si procede): Begoña Milián Medina

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

TÍTULO

Moléculas MOST (Molecular Solar Thermal Storage): la idea, los resultados y las perspectivas futuras de una tecnología para almacenar energía solar a nivel molecular.

OBJETIVOS

El proyecto propuesto pretende:

- que el estudiante aprenda a efectuar una búsqueda bibliográfica de forma crítica, evaluando la fiabilidad de las fuentes encontradas.
- que el estudiante se familiarice con la temática de los MOST, que constituyen una posible forma de almacenar energía solar.
- que el estudiante sepa dibujar una perspectiva general sobre el estado del arte de dicha temática.
- que el estudiante sepa proporcionar una opinión crítica y razonada sobre las perspectiva futuras del tema.

METODOLOGÍA

Principalmente se utilizarán bases de datos y motores de búsqueda como por ejemplo el "Web of Science".



(Sello del Departamento)

TEMA TREBALL FI DE GRAU
GRAU EN QUÍMICA

TUTOR/A ACADÈMIC/A: Rafael Muñoz-Espí

TUTOR/A ACADÈMIC/A (si escau): María González-Béjar (Q. Orgànica)

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

TÍTOL

Funcionalització de nanopartícules polimèriques amb lligands metal·locomplexants

OBJECTIUS

- Selecció de lligands quirals amb utilitat potencial en catàlisi asimètrica que puguen ser derivatitzats per fer-los reactius en polimerització radicalària o, alternativament, que puguen reaccionar amb partícules polimèriques ja preparades.
- Establiment de les rutes sintètiques 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. Hi ha dues possibilitats: o bé que els lligands incorporen un grup polimeritzable o bé que incorporen un grup capaç de reaccionar amb nanopartícules funcionals prèviament preparades. 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, 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 funcionals 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. Fe, Mn, Co).

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.



(segell del Departament)

TRABAJO FINAL DE GRADO
GRADO EN QUÍMICA

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

TUTOR/A ACADÉMICO/A (si procede):

TUTOR/A EXTERNO/A (si procede):

TÍTULO

Separación de contribuciones de corto y largo rango en cálculos químico-cuánticos.

OBJETIVOS

Analizar la eficiencia de métodos híbridos srDFT frente a métodos standard DFT o WF

METODOLOGÍA

Se compararán los resultados y costes computacionales para la determinación de propiedades moleculares a partir bien de métodos tradicionales (FCI, CC, MP2, CASSCF o DFT) bien métodos híbridos basados en la separación de las contribuciones coulombicas de corto/largo alcance.



(Sello del Departamento)

TEMA TREBALL FI DE GRAU
GRAU EN QUÍMICA

Inmaculada García Cuesta

TUTOR/A ACADÈMIC/A: _____

TUTOR/A ACADÈMIC/A (si escau): _____

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

TÍTOL

Estudio teórico de propiedades magnéticas en sistemas aromáticos policíclicos. Efectos de las corriente de anillo sobre los apantallamientos nucleares magnéticos.

OBJECTIUS

Determinación teórica de la respuesta local a la aplicación de un campo magnético externo perpendicular al plano molecular en moléculas aromáticas policíclicas. Análisis y racionalización de la aromaticidad magnética mediante la ley de Biot-Savart.

METODOLOGIA

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



(segell del Departament)

VNIVERSITAT (ò*) E VALÈNCIA] Facultat de Química

TEMA TREBALL FI DE GRAU GRAU EN QUÍMICA

TUTORIA ACADEMICA: Jesus Vicente de Julián Ortiz

TUTORIA del TREBALL (si escau)*:

TUTORIA EXTERNA (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 que algun dels tutors no complisca els requisits per a ser tutor acadèmic

(segell del Departament)

