NÚM	TEMA	TUTOR(S) ACADÈMIC(S)	TUTOR EXTERN (si escau)	DEPARTAMENTO
2	Aplicación de técnicas computacionales en la evaluación de la seguridad y sostenibilidad de nuevos productos durante su desarrollo	José Luis Vallés	ProtoQSAR	GRUPO EM
3	Medición de Plasticidad en Materiales Arcillosos	José Enrique Clar Palomares	TORRECID	GRUPO EM

VNIVERSITAT DE VALÈNCIA Facultat de Química

TRABAJO FINAL DE GRADO
GRADO EN QUÍMICA

TUTOR/A ACADÉMICO/A:

TUTOR/A ACADÉMICO/A (si procede):

TUTOR/A EXTERNO/A (si procede): JosØLuis VallØs

Departamento:

TÍTULO

Aplicaci n de tØcnicas computacionales en la evaluaci n 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 tØcnicascomputacionales para evaluar la seguridad y la sostenibilidad de nuevos materiales o productos qu micos en la fase de desarrollo, es decir previamente a su fabricaci n. Concretamente, el trabajo tiene los siguientes objetivos espec ficos:
-Evaluaci n bibliogrÆficade los recursos disponibles, de la reglamentaci n aplicable y de las propuestas incluidas en la literatura y en proyectos similares
-Compilaci n automatizada de informaci n proveniente de bases de datos, mediante el uso de APIs y scripts.
-Uso de modelos de predicci n quimioinformÆticos(como QSAR o read across) para predecir la (eco)toxicidad y otras propiedades relevantes de los compuestos de interØs.Evaluaci n de la idoneidad y calidad de los mØtodospredictivos disponibles.

METODOLOGÍA

El proyecto se enmarca en el Æmbitode la quimioinformÆticay por lo tanto las metodolog as que se utilizarÆnson de carÆctercomputacional. El estudiante desarrollarÆsus habilidades de programaci n en Python, ya sea para crear sus propios scripts o para utilizar/modificar los programas que se le proporcionarÆn.
El manejo de las bases de datos, tanto de la interna del proyecto como de las bases externas consultadas, se harÆprincipalmente a travØsde scripts Python, usando tanto librer as espec ficas para la lectura de bases de datos (APIs) como otras que extraen la informaci n de los recursos en linea via web (web-scrapping).
Las predicciones se harÆnutilizando mØtodosde aprendizaje automÆtico(Machine-Learning) basados en datos qu micos y en descriptores moleculares tales como QSAR y read-accross. El trabajo incluirÆel uso y evaluaci n estad stica de modelos propios de la empresa, as como otros disponibles en herramientas externas. El trabajo puede incluir el desarrollo o refinamiento de los modelos de predicci n.

(Sello del Departamento)

VNIVERSITAT DE VALÈNCIA Facultat de Química

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 Enrique Clar Palomares

Departament:

TITLE

Medición de Plasticidad en Materiales Arcillosos.

OBJECTIUS / OBJECTIVES / OBJETIVOS (Choose the language)

Obtener un método que nos permita identificar objetivamente la plasticidad de los diferentes minerales arcillosos.

METODOLOGIA / METHODOLOGY / METODOLOGÍA (Choose the language)

Probar diferentes Ensayos:
- Método Pfefferkorn.
- Contracción de Secado
- Resistencia Mecánica
- Ensayo de BET
- Viscosidad reológica.

TORRECID