

GRADO EN QUÍMICA// DOBLE GRADO EN QUÍMICA E INGENIERÍA DE MATERIALES



Facultad de Química

PROPUESTA DE TRABAJO FIN DE GRADO

CURSO ACADÉMICO 2024/2025:

TÍTULO (Español)	Construcción y Caracterización de Plataformas Electroquímicas basadas en Estructuras Metalorgánicas Superficiales.
TÍTULO (Inglés)	Construction and Characterization of Surface Metalorganic Structures based Electrochemical Platforms
DEPARTAMENTO	Química Física
Area de Conocimiento	Química Física
TUTORES (máximo 2) (Indicar categoría)	José Luis Olloqui Sariego (Profesor Titular)
OBJETIVOS (max. 600 caracteres)	
<ul style="list-style-type: none">- Síntesis de estructuras metalorgánicas superficiales.- Preparar electrodos modificados con estructuras metalorgánicas superficiales.- Caracterizar la respuesta electroquímica del electrodo construido.- Caracterizar la actividad electrocatalítica del material depositado.	
METODOLOGÍA (max. 600 caracteres)	
<ul style="list-style-type: none">- Optimización del protocolo de síntesis de estructuras metalorgánicas superficiales.- Caracterización morfológica y estructural del material sintetizado utilizando técnicas microscópicas y espectroscópicas.- Caracterización de la respuesta electroquímica y electrocatalítica del material inmovilizado sobre electrodos, utilizando la técnica de voltametría cíclica.	
VºBº DIRECTOR/A DEPARTAMENTO	PROFESORES TUTORES
FECHA 20/09/2024	FECHA 20/09/2024
	OLLOQUI SARIEGO JOSE LUIS - 28764655G Firmado digitalmente por OLLOQUI SARIEGO JOSE LUIS - 28764655G Fecha: 2024.09.20 16:12:33 +02'00'
FIRMADO. Germán López	FIRMADO José Luis Olloqui Sariego

Código Seguro De Verificación	GVxdap304z9x6+N84ZtqYQ==	Fecha	23/09/2024
Firmado Por	GERMAN LOPEZ PEREZ	Página	1/1
Url De Verificación	https://pfirma.us.es/verifirma/code/GVxdap304z9x6%2BN84ZtqYQ%3D%3D		



GRADO EN QUÍMICA// DOBLE GRADO EN QUÍMICA E INGENIERÍA DE MATERIALES



Facultad de Química

PROPUESTA DE TRABAJO FIN DE GRADO

CURSO ACADÉMICO 2024/2025:

TÍTULO (Español)	Desarrollo de un Sensor Electroquímico basado en un Polímero de Coordinación Poroso de Cobalto.
TÍTULO (Inglés)	Development of a Cobalt Metal-Organic Framework (MOF)-based Electrochemical Sensor
DEPARTAMENTO	Química Física
Area de Conocimiento	Química Física
TUTORES (máximo 2) (Indicar categoría)	José Luis Olloqui Sariego (Profesor Titular) Inmaculada Márquez Escudero (Profesor Sustituto Interino)
OBJETIVOS (max. 600 caracteres)	
<ul style="list-style-type: none">- Preparar electrodos modificados con un polímero de coordinación poroso de cobalto (MOF).- Caracterizar la respuesta electroquímica del MOF de cobalto.- Caracterizar la respuesta electrocatalítica para la reacción de oxidación de analitos de interés clínico.	
METODOLOGÍA (max. 600 caracteres)	
<ul style="list-style-type: none">- Optimización del protocolo de inmovilización del MOF de cobalto sobre diferentes tipos de electrodos de carbón.- Caracterización de la respuesta electroquímica del MOF de cobalto inmovilizado sobre electrodos en función del pH de la disolución, utilizando la técnica de voltametría cíclica.- Caracterización y cuantificación de la respuesta electrocatalítica correspondiente a los procesos de oxidación de analitos de interés clínico, mediante voltametría cíclica y voltametría de pulso diferencial.- Determinación de los parámetros de operación característicos del sensor electroquímico desarrollado.	
VºBº DIRECTOR/A DEPARTAMENTO	PROFESORES TUTORES
FECHA 20/09/2024	FECHA 20/09/2024
	<p>OLLOQUI SARIEGO JOSE LUIS - 28764655G Firmado digitalmente por OLLOQUI SARIEGO JOSE LUIS - 28764655G Fecha: 2024.09.20 16:09:32 +02'00'</p> <p>MARQUEZ ESCUDERO INMACULADA - 30225208B Firmado digitalmente por MARQUEZ ESCUDERO INMACULADA - 30225208B Fecha: 2024.09.20 13:23:16 +02'00'</p>
FIRMADO. Germán López	FIRMADO José Luis Olloqui e Inmaculada Márquez

Código Seguro De Verificación	r2x8yVDvbMyxHM1fbIwLnA==	Fecha	23/09/2024
Firmado Por	GERMAN LOPEZ PEREZ	Página	1/1
Url De Verificación	https://pfirma.us.es/verifirma/code/r2x8yVDvbMyxHM1fbIwLnA%3D%3D		



GRADO EN QUÍMICA// DOBLE GRADO EN QUÍMICA E INGENIERÍA DE MATERIALES



Facultad de Química

PROPUESTA DE TRABAJO FIN DE GRADO

CURSO ACADÉMICO 2024/2025:

TÍTULO (Español)	Estudio de disoluciones iónicas acuosas a través de simulaciones de dinámica molecular
TÍTULO (Inglés)	Study of ionic aqueous solutions by means of Molecular Dynamics simulations
DEPARTAMENTO	Química Física
Area de Conocimiento	Química Física
TUTORES (máximo 2) (Indicar categoría)	José Manuel Martínez Fernández Jaime Oviedo López
En el caso de que el alumno deba realizar el trabajo en una instalación externa a la Facultad de Química, indíquelo:	
OBJETIVOS (max. 600 caracteres) Caracterizar la estructura y dinámica de disoluciones iónicas en condiciones termodinámicas y de composición diferente. Estudiar la dependencia de la formación de pares iónicos de contacto o separados por el disolvente en función de la naturaleza de los aniones (haluros, nitratos, carbonatos), de los cationes (alcalinos, alcalinotérreos y de metales de transición), la concentración de la sal y de la presión y temperatura. La caracterización permitirá obtener información adicional de carácter estructural y dinámico sobre la estructura de la disolución y la eventual identificación y caracterización de pares iónicos. En este último caso, se estimarán las constantes de asociación que se podrán comparar con la información experimental disponible.	
METODOLOGÍA (max. 600 caracteres) El proyecto se realizará a través de cálculos estadísticos con ayuda del ordenador, usando el programa de simulación DLPOLY. Se empleará metodología estándar en el método de dinámica molecular, con campos de fuerzas que representan las interacciones, tanto para los iones como para el disolvente. Se trabajará considerando un rango de concentraciones de las sales en los colectivos NVT y NPT. Eventualmente, se podrán realizar cálculos de potencial de fuerza media entre iones (constraint molecular dynamics) para concentraciones de sal suficientemente bajas.	
VºBº DIRECTOR/A DEPARTAMENTO	PROFESORES TUTORES
FECHA	FECHA 18/09/2024
FIRMADO.	FIRMADO MARTINEZ FERNANDEZ JOSE MANUEL - 75435608R Firmado digitalmente por MARTINEZ FERNANDEZ JOSE MANUEL - 75435608R Fecha: 2024.09.18 13:08:55 +02'00' OVIEDO LOPEZ JAIME - 31657735Y Firmado digitalmente por OVIEDO LOPEZ JAIME - 31657735Y Fecha: 2024.09.18 13:11:50 +02'00'

Código Seguro De Verificación	ZtasPw7kRSv1GXQrrs1GPg==	Fecha	23/09/2024
Firmado Por	GERMAN LOPEZ PEREZ	Página	1/1
Url De Verificación	https://pfirma.us.es/verifirma/code/ZtasPw7kRSv1GXQrrs1GPg%3D%3D		



GRADO EN QUÍMICA// DOBLE GRADO EN QUÍMICA E INGENIERÍA DE MATERIALES



Facultad de Química

PROPUESTA DE TRABAJO FIN DE GRADO

CURSO ACADÉMICO 2024/2025:

TÍTULO (Español)	Preparación y caracterización de películas lipídicas y su interacción con moléculas de interés biológico o farmacológico
TÍTULO (Inglés)	Preparation and characterization of lipid films and the interaction with molecules with biological or pharmacological interest.
DEPARTAMENTO	Química Física
Area de Conocimiento	Química Física
TUTORES (máximo 2) (Indicar categoría)	Julia Álvarez Malmagro (AYD) Francisco Prieto Dapena (TU)

En el caso de que el alumno deba realizar el trabajo en una instalación externa a la Facultad de Química, indíquelo:

OBJETIVOS (max. 600 caracteres)

El objetivo de este trabajo es preparar diferentes tipos de películas lipídicas soportadas o no (monocapas, bicapas soportadas, bicapas ancladas y bicapas flotantes). Su caracterización empleando métodos electroquímicos y el estudio de interacciones con moléculas que presentan interés biológico o farmacológico

METODOLOGÍA (max. 600 caracteres)

La metodología a emplear incluye métodos y electroquímicos y de preparación de películas superficiales (balanza de Langmuir, transferencias de Blodgett y de Shaeffer).

VºBº DIRECTOR/A DEPARTAMENTO	PROFESORES TUTORES
FECHA	FECHA 19 DE SEPTIEMBRE 2024
FIRMADO.	FIRMADO Julia Álvarez Malmagro Francisco Prieto Dapena

Código Seguro De Verificación	i9DpYQYA9zPeNKXLOoE20w==	Fecha	19/09/2024	
Firmado Por	FRANCISCO PRIETO DAPENA JULIA ALVAREZ MALMAGRO			
Url De Verificación	https://pfirma.us.es/verifirma/code/i9DpYQYA9zPeNKXLOoE20w%3D%3D	Página	1/1	

Código Seguro De Verificación	2pVPhkMFG0SLj126J1MohA==	Fecha	23/09/2024	
Firmado Por	GERMAN LOPEZ PEREZ			
Url De Verificación	https://pfirma.us.es/verifirma/code/2pVPhkMFG0SLj126J1MohA%3D%3D	Página	1/1	

GRADO EN QUÍMICA// DOBLE GRADO EN QUÍMICA E INGENIERÍA DE MATERIALES



Facultad de Química

PROPUESTA DE TRABAJO FIN DE GRADO

CURSO ACADÉMICO 2024/2025:

TÍTULO (Español)	Nanotubos de titanio como una plataforma inteligente para la liberación controlada de antioxidantes naturales
TÍTULO (Inglés)	Titanium nanotubes as a smart platform for controlled release of natural antioxidants
DEPARTAMENTO	Química Física
Area de Conocimiento	Química Física
TUTORES (máximo 2) (Indicar categoría)	Francisco José Ostos Marcos

En el caso de que el alumno deba realizar el trabajo en una instalación externa a la Facultad de Química, indíquelo:

Centro de Investigación, Tecnología e Innovación de la Universidad de Sevilla (CITIUS).

OBJETIVOS (max. 600 caracteres)

Estudiar el empleo de nanotubos de titanio como sistemas de liberación controlada de antioxidantes de origen natural.

METODOLOGÍA (max. 600 caracteres)

1. Realizar búsquedas en bases de datos bibliográficas.
2. Caracterizar fisicoquímicamente los NTTs y los complejos formados de NTT@antioxidante mediante medidas de potencial zeta, dispersión dinámica de luz y microscopía de transmisión electrónica.
3. Determinar la capacidad antioxidante del complejo NTT@antioxidante.
4. Redacción del TFG.

El tutor mantendrá reuniones periódicas de seguimiento y resolución de dudas con el alumno.

VºBº DIRECTOR/A DEPARTAMENTO	PROFESORES TUTORES
FECHA	FECHA
FIRMADO. Germán López Pérez	FIRMADO Francisco José Ostos Marcos

Código Seguro De Verificación	6kiwxcEGXdjNSR/LYtd3iQ==	Fecha	19/09/2024	
Firmado Por	FRANCISCO JOSE OSTOS MARCOS	Página	1/1	
Url De Verificación	https://pfirma.us.es/verifirma/code/6kiwxcEGXdjNSR%2FLYtd3iQ%3D%3D			

Código Seguro De Verificación	0U12640fGDWSrsPNZGG5wA==	Fecha	23/09/2024	
Firmado Por	GERMAN LOPEZ PEREZ	Página	1/1	
Url De Verificación	https://pfirma.us.es/verifirma/code/0U12640fGDWSrsPNZGG5wA%3D%3D			

GRADO EN QUÍMICA// DOBLE GRADO EN QUÍMICA E INGENIERÍA DE MATERIALES



Facultad de Química

PROPUESTA DE TRABAJO FIN DE GRADO

CURSO ACADÉMICO 2024/2025:

TÍTULO (Español)	Encapsulación y liberación de péptidos antimicrobianos en liposomas poliméricos biocompatibles
TÍTULO (Inglés)	Encapsulation and release of antimicrobial peptides in biocompatible polymeric liposomes
DEPARTAMENTO	Química Física
Area de Conocimiento	Química Física
TUTORES (máximo 2) (Indicar categoría)	Pilar López Cornejo

En el caso de que el alumno deba realizar el trabajo en una instalación externa a la Facultad de Química, indíquelo:

Centro de Investigación, Tecnología e Innovación de la Universidad de Sevilla (CITIUS).

OBJETIVOS (max. 600 caracteres)

Preparación y caracterización de nuevos liposomas poliméricos biocompatibles. Estudio de los procesos de encapsulación y liberación de péptidos antimicrobianos en dichos liposomas.

METODOLOGÍA (max. 600 caracteres)

1. Realizar búsquedas en bases de datos bibliográficas.
2. Síntesis y caracterización de nuevos liposomas poliméricos.
3. Estudio del proceso de encapsulación (y de liberación) de péptidos antimicrobianos de diferente naturaleza en los nanosistemas preparados.
4. Redacción del TFG.

El tutor mantendrá reuniones periódicas de seguimiento con el alumno.

VºBº DIRECTOR/A DEPARTAMENTO	PROFESORES TUTORES
FECHA	FECHA
FIRMADO. GERMÁN LÓPEZ PÉREZ	FIRMADO Pilar López Cornejo

Código Seguro De Verificación	Z56gE99enw9QcdA+Z+dnoQ==	Fecha	19/09/2024	
Firmado Por	MARIA PILAR LOPEZ CORNEJO	Página	1/1	
Url De Verificación	https://pfirma.us.es/verifirma/code/Z56gE99enw9QcdA%2BZ%2BdnoQ%3D%3D			

Código Seguro De Verificación	P5fz88S/R4/dqKdb2H68QA==	Fecha	23/09/2024	
Firmado Por	GERMAN LOPEZ PEREZ	Página	1/1	
Url De Verificación	https://pfirma.us.es/verifirma/code/P5fz88S%2FR4%2FdqKdb2H68QA%3D%3D			

GRADO EN QUÍMICA// DOBLE GRADO EN QUÍMICA E INGENIERÍA DE MATERIALES



Facultad de Química

PROPUESTA DE TRABAJO FIN DE GRADO

CURSO ACADÉMICO 2024/2025:

TÍTULO (Español)	Influencia del peso molecular del polietilenglicol, PEG, en las características de las nanopartículas de PLGA+PEG como nanovehículos de moléculas con actividad terapéutica.
TÍTULO (Inglés)	Influence of the polyethylene glycol, PEG, molecular weight on the characteristics of the PLGA+PEG nanoparticles as nanocarriers of species with therapeutic activity.
DEPARTAMENTO	Química Física
Area de Conocimiento	Química Física
TUTORES (máximo 2) (Indicar categoría)	María Luisa Moyá Morán (Catedrática de Universidad) Victoria Isabel Martín Herrera (Profesor sustituto interino)
Se utilizarán distintos Servicios Generales de la Universidad de Sevilla que están ubicados en el CITIUS.	
OBJETIVOS (max. 600 caracteres)	
El objetivo de este trabajo es la preparación y caracterización de nanopartículas de PLGA+PEG utilizando PEGs de diferentes pesos moleculares. Esto permitirá saber qué nanopartículas pueden ser más adecuadas para la encapsulación y posterior liberación de moléculas con actividad terapéutica.	
METODOLOGÍA (max. 600 caracteres)	
1.-Leer bibliografía que permita familiarizarse con el tema de trabajo propuesto en el TFG. 2.-Realizar la parte experimental. 3.-Reuniones periódicas para analizar los resultados obtenidos. 4.-Redacción del TFG.	
VºBº DIRECTOR/A DEPARTAMENTO	PROFESORES TUTORES
FECHA	FECHA 19/09/2024
FIRMADO.	FIRMADO María Luisa Moyá y Victoria Isabel Martín Herrera

Código Seguro De Verificación	p7BkDg/hYZGGMgei0tuyCw==	Fecha	23/09/2024
Firmado Por	GERMAN LOPEZ PEREZ	Página	1/1
Url De Verificación	https://pfirma.us.es/verifirma/code/p7BkDg%2FhYZGGMgei0tuyCw%3D%3D		



GRADO EN QUÍMICA// DOBLE GRADO EN QUÍMICA E INGENIERÍA DE MATERIALES



Facultad de Química

PROPUESTA DE TRABAJO FIN DE GRADO

CURSO ACADÉMICO 2024/2025:

TÍTULO (Español)	Optimización de la síntesis de nano- y micropartículas poliméricas biocompatibles de PHB
TÍTULO (Inglés)	Optimization of the synthesis of biocompatible polymeric nano- and microparticles of PHB
DEPARTAMENTO	Química Física
Area de Conocimiento	Química Física
TUTORES (máximo 2) (Indicar categoría)	María Luisa Moyá Morán (Catedrática de Universidad)

Se utilizarán distintos Servicios Generales de la Universidad de Sevilla que están ubicados en el CITIUS.

OBJETIVOS (max. 600 caracteres)

El objetivo es optimizar la metodología de preparación de nano- y micropartículas del polímero biocompatible PHB, para que se puedan obtener sistemas con las características más adecuadas que permitan su utilización como vehículos para la encapsulación de diferentes moléculas de interés terapéutico.

METODOLOGÍA (max. 600 caracteres)

- 1.-Leer bibliografía que permita familiarizarse con el tema de trabajo propuesto en el TFG.
- 2.-Realizar la parte experimental.
- 3.-Reuniones periódicas para analizar los resultados obtenidos.
- 4.-Redacción del TFG.

VºBº DIRECTOR/A DEPARTAMENTO	PROFESORES TUTORES
FECHA	FECHA 19/09/2024
	MOYA MORAN MARIA LUISA - 28701449W Firmado digitalmente por MOYA MORAN MARIA LUISA - 28701449W Fecha: 2024.09.19 12:16:07 +02'00'
FIRMADO.	FIRMADO María Luisa Moyá

Código Seguro De Verificación	JkCYzuc9tdEQ/Qj4Ltw8nQ==	Fecha	23/09/2024
Firmado Por	GERMAN LOPEZ PEREZ	Página	1/1
Url De Verificación	https://pfirma.us.es/verifirma/code/JkCYzuc9tdEQ%2FQj4Ltw8nQ%3D%3D		



GRADO EN QUÍMICA// DOBLE GRADO EN QUÍMICA E INGENIERÍA DE MATERIALES



Facultad de Química

PROPUESTA DE TRABAJO FIN DE GRADO

CURSO ACADÉMICO 2024/2025:


TÍTULO (Español)	Caracterización de intermedios de reacción en catálisis heterogénea a través de simulaciones de espectros de XPS
TÍTULO (Inglés)	Characterization of reaction intermediates in heterogeneous catalysis by XPS spectra simulations
DEPARTAMENTO	Química Física
Area de Conocimiento	Química Física
TUTORES (máximo 2) (Indicar categoría)	Antonio M. Márquez Cruz (Catedrático de Universidad) José Javier Plata Ramos (Profesor Titular de Universidad)
En el caso de que el alumno deba realizar el trabajo en una instalación externa a la Facultad de Química, indíquelo:	
OBJETIVOS (max. 600 caracteres)	
En este proyecto se desarrollará una estrategia para comparar la simulación de espectros de XPS de moléculas adsorbidas en superficie con medidas experimentales, con el objetivo de identificar intermedios de reacción en la reacción OER. De esta manera será no sólo posible identificar intermedios de reacción sino entender el mecanismo del proceso catalítico y proponer mejoras del mismo.	
METODOLOGÍA (max. 600 caracteres)	
<ul style="list-style-type: none">Estudio avanzado de las técnicas basadas en la Teoría del Funcional de la Densidad, DFT, para la simulación de espectros de XPS.Introducción al lenguaje de programación Python y al Machine Learning.Simulación de superficies y estudio de la adsorción de moléculas.Cálculo de perfiles de reacción, incluyendo intermedios y estados de transición.Simulación de señales de XPS de especies adsorbidas en superficies.	
VºBº DIRECTOR/A DEPARTAMENTO	PROFESORES TUTORES
FECHA	FECHA


Código Seguro De Verificación	3XRP4Wsc1QfAZcGB1F3uNQ==	Fecha	20/09/2024	
Firmado Por	ANTONIO MARCIAL MARQUEZ CRUZ JOSE JAVIER PLATA RAMOS			
Url De Verificación	https://pfirma.us.es/verifirma/code/3XRP4Wsc1QfAZcGB1F3uNQ%3D%3D	Página	1/2	

Código Seguro De Verificación	Pji/+Q2IePBX/p6bMtYPqg==	Fecha	23/09/2024	
Firmado Por	GERMAN LOPEZ PEREZ			
Url De Verificación	https://pfirma.us.es/verifirma/code/Pji%2F%2BQ2IePBX%2Fp6bMtYPqg%3D%3D	Página	1/2	

GRADO EN QUÍMICA// DOBLE GRADO EN QUÍMICA E INGENIERÍA DE MATERIALES

TÍTULO (Español)	Caracterización de intermedios de reacción en catálisis heterogénea a través de simulaciones de espectros de XPS
TÍTULO (Inglés)	Characterization of reaction intermediates in heterogeneous catalysis by XPS spectra simulations
DEPARTAMENTO	Química Física
Area de Conocimiento	Química Física
FIRMADO. GERMÁN LÓPEZ PÉREZ	FIRMADO Antonio M. Márquez / José J. Plata

Código Seguro De Verificación	3XRP4Wsc1QfAZcGB1F3uNQ==	Fecha	20/09/2024	
Firmado Por	ANTONIO MARCIAL MARQUEZ CRUZ JOSE JAVIER PLATA RAMOS			
Url De Verificación	https://pfirma.us.es/verifirma/code/3XRP4Wsc1QfAZcGB1F3uNQ%3D%3D	Página	2/2	

Código Seguro De Verificación	Pji/+Q2IePBX/p6bMtYPqg==	Fecha	23/09/2024	
Firmado Por	GERMAN LOPEZ PEREZ			
Url De Verificación	https://pfirma.us.es/verifirma/code/Pji%2F%2BQ2IePBX%2Fp6bMtYPqg%3D%3D	Página	2/2	

GRADO EN QUÍMICA// DOBLE GRADO EN QUÍMICA E INGENIERÍA DE MATERIALES



Facultad de Química

PROPUESTA DE TRABAJO FIN DE GRADO

CURSO ACADÉMICO 2024/2025:

TÍTULO (Español)	Funcionalización de la superficie de Bi_2Te_3 para su mejora como material termoeléctrico.
TÍTULO (Inglés)	Surface functionalization of Bi_2Te_3 surfaces for enhancing its thermoelectric efficiency
DEPARTAMENTO	Química Física
Area de Conocimiento	Química Física
TUTORES (máximo 2) (Indicar categoría)	Antonio M. Márquez Cruz (Catedrático de Universidad) José Javier Plata Ramos (Profesor Titular de Universidad)

En el caso de que el alumno deba realizar el trabajo en una instalación externa a la Facultad de Química, indíquelo:

OBJETIVOS (max. 600 caracteres)

El objetivo principal de este proyecto es el análisis de la estructura electrónica de superficies de Bi_2Te_3 funcionalizadas con el fin de mejorar las prestaciones termoeléctricas de este material.

METODOLOGÍA (max. 600 caracteres)

- Estudio avanzado de las técnicas basadas en la Teoría del Funcional de la Densidad, DFT.
- Cálculo de estructura de bandas de sólidos.
- Simulación de superficies y estudio de la adsorción ligandos.
- Cálculo de masas efectivas.

VºBº DIRECTOR/A DEPARTAMENTO	PROFESORES TUTORES
FECHA	FECHA
FIRMADO.	FIRMADO

Código Seguro De Verificación	pGQWv1wXUu7FSac037w61g==	Fecha	23/09/2024	
Firmado Por	ANTONIO MARCIAL MARQUEZ CRUZ JOSE JAVIER PLATA RAMOS			
Url De Verificación	https://pfirma.us.es/verifirma/code/pGQWv1wXUu7FSac037w61g%3D%3D	Página	1/1	

Código Seguro De Verificación	FYhFHFmrNKir3H64T7Cf+A==	Fecha	23/09/2024	
Firmado Por	GERMAN LOPEZ PEREZ			
Url De Verificación	https://pfirma.us.es/verifirma/code/FYhFHFmrNKir3H64T7Cf%2BA%3D%3D	Página	1/1	

GRADO EN QUÍMICA// DOBLE GRADO EN QUÍMICA E INGENIERÍA DE MATERIALES



Facultad de Química

PROPUESTA DE TRABAJO FIN DE GRADO

CURSO ACADÉMICO 2024/2025:

TÍTULO (Español)	Estudio de las interacciones entre tensioactivos y nanotubos de carbono
TÍTULO (Inglés)	Study of the interactions between surfactants and carbon nanotubes
DEPARTAMENTO	Química Física
Area de Conocimiento	Química Física
TUTORES (máximo 2) (Indicar categoría)	Pilar López Cornejo (Catedrática de Universidad) José Javier Plata Ramos (Profesor Titular de Universidad)
En el caso de que el alumno deba realizar el trabajo en una instalación externa a la Facultad de Química, indíquelo:	
OBJETIVOS (max. 600 caracteres)	
Estudio de las interacciones entre tensioactivos y nanotubos de carbono combinando modelización molecular y técnicas experimentales.	
METODOLOGÍA (max. 600 caracteres)	
<ul style="list-style-type: none">Estudio avanzado de las técnicas basadas en la Teoría del Funcional de la Densidad, DFT.Simulación de superficies y estudio de la adsorción de moléculas.Realización de medidas potenciométricas	
VºBº DIRECTOR/A DEPARTAMENTO	PROFESORES TUTORES
FECHA	FECHA
FIRMADO. GERMÁN LÓPEZ PÉREZ	FIRMADO Pilar López Cornejo / José Javier Plata Ramos

Código Seguro De Verificación	FeM3WJK6mVqqpVymZ1He8A==	Fecha	20/09/2024	
Firmado Por	MARIA PILAR LOPEZ CORNEJO JOSE JAVIER PLATA RAMOS	Página	1/1	
Url De Verificación	https://pfirma.us.es/verifirma/code/FeM3WJK6mVqqpVymZ1He8A%3D%3D			

Código Seguro De Verificación	tdpAkA8mspLYRwvp+RWYQw==	Fecha	23/09/2024	
Firmado Por	GERMAN LOPEZ PEREZ	Página	1/1	
Url De Verificación	https://pfirma.us.es/verifirma/code/tdpAkA8mspLYRwvp%2BRWYQw%3D%3D			

GRADO EN QUÍMICA

TRABAJO



PROPUESTA DE TRABAJO FIN DE GRADO

Facultad de Química

CURSO ACADÉMICO 2024/2025:

TÍTULO	Estudios sobre el efecto del pH en la corrosión de muestras metálicas de distinta composición
DEPARTAMENTO	Química Física
Area de Conocimiento	Química Física
TUTORES (máximo 2) (Indicar categoría)	Domingo González Arjona (CU) German López Pérez (TU)
En el caso de que el alumno deba realizar el trabajo en una instalación externa a la Facultad de Química, indíquelo:	
OBJETIVOS (max. 600 caracteres)	
Se propone realizar estudios electroquímicos sobre piezas metálicas (metales puros y aleaciones) en presencia de electrolitos con distintos valores de pH. Se busca también establecer un procedimiento de preparación de muestras para muestras metálicas. Se establecerán los principales parámetros electroquímicos de la corrosión en base a las curvas potenciodinámicas. Los resultados obtenidos se podrán aplicar a algunas muestras del patrimonio artístico y/o arqueológico.	
METODOLOGÍA (max. 600 caracteres)	
La caracterización y estudio de las muestras se realizará mediante técnicas electroquímicas de corriente continua (curvas potenciodinámicas) mediante los diagramas de Evans. Con los datos obtenidos se pretende obtener información microscópica de los procesos superficiales que tienen lugar y por tanto, proponer métodos de protección o inhibición más efectivos.	

VºBº DIRECTOR/A DEPARTAMENTO	PROFESORES TUTORES
FECHA: 23 SEPTIEMBRE 2024	FECHA: 23 SEPTIEMBRE 2024
FIRMADO: GERMAN LÓPEZ PÉREZ	FIRMADO: D. González Arjona y G. López Pérez

Código Seguro De Verificación	yhKblccsE5oCZmYmGjBeDw==	Fecha	23/09/2024	
Firmado Por	GERMAN LOPEZ PEREZ DOMINGO GONZALEZ ARJONA			
Url De Verificación	https://pfirma.us.es/verifirma/code/yhKblccsE5oCZmYmGjBeDw%3D%3D	Página	1/1	

Código Seguro De Verificación	rQdYzZPqQD2ZxmvJYuodwA==	Fecha	23/09/2024	
Firmado Por	GERMAN LOPEZ PEREZ			
Url De Verificación	https://pfirma.us.es/verifirma/code/rQdYzZPqQD2ZxmvJYuodwA%3D%3D	Página	1/1	



Facultad de Química

PROPUESTA DE TRABAJO FIN DE GRADO

CURSO ACADÉMICO 2024/2025:

TÍTULO (Español)	Estudio sobre la importancia de la solvatación de cationes metálicos en acetonitrilo: una aproximación teórica
TÍTULO (Inglés)	Study on the importance of metal cation solvation in acetonitrile: a theoretical approach
DEPARTAMENTO	Química Física
Area de Conocimiento	Química Física
TUTORES (máximo 2) (Indicar categoría)	Enrique Sánchez Marcos
OBJETIVOS (max. 600 caracteres)	
<p>La disolución de iones metálicos en disolventes no acuosos presenta alternativas químicamente importantes en diversos campos como son la síntesis, la separación de especies, la extracción selectiva o las aplicaciones hidrometalúrgicas. Unos ejemplos de ello son el caso del Cu(I), inestable en disolución acuosa, pero estable en acetonitrilo (AN), o el uso de este disolvente en baterías de Li, donde la estabilidad del electrodo de litio se garantiza al no emplear agua en el electrolito.</p> <p>En este trabajo se abordará un estudio mecano-cuántico del conjunto de complejaciones con moléculas de AN, de los iones Ag(I), Cu(I), Cu(II), Ni(II) y Co(II). Se examinará la estabilidad relativa de distintos complejos en disolución, modificando el grado de solvatación y teniendo en cuenta efectos del medio condensado. Caracterizadas sus estructuras se buscarán relaciones entre éstas y las formas de los espectros de absorción de EXAFS y XANES experimentales de las disoluciones diluídas de estos iones. Ello constituye una de las formas más efectivas para su identificación y caracterización.</p>	
METODOLOGÍA (max. 600 caracteres)	
<p>Para llevar a cabo este proyecto se emplearán programas de química cuántica, en concreto los códigos Gaussian-16 y ORCA5, que permiten cálculos con pseudopotenciales para describir los metales pesados y el empleo de un modelo de solvatación para tener en cuenta los efectos del disolvente. Los espectros simulados EXAFS y XANES serán obtenidos mediante el programa FEFF10. Las fluctuaciones geométricas con la temperatura y el desorden estructural serán tratados mediante técnicas de muestreo de Wigner. Para el tratamiento de datos el estudiante habrá de familiarizarse con métodos de la Química Cuántica y la espectroscopia de Absorción de Rayos X, el sistema operativo Linux, el uso de servidores de cálculo con multiprocesadores, programas de edición, tratamiento de datos y representaciones moleculares.</p>	
VºBº DIRECTOR/A DEPARTAMENTO	PROFESORES TUTORES
FECHA	FECHA 20-SEPTIEMBRE -2024
	<i>Firmado por SANCHEZ MARCOS ENRIQUE - ***2728** el día 20/09/2024 con un certificado emitido por AC FNMT Usuarios</i>
FIRMADO. GERMÁN LÓPEZ PÉREZ	FIRMADO Enrique Sánchez Marcos

Código Seguro De Verificación	IFIg2TLhpaPe4i/pCWqeFQ==	Fecha	23/09/2024
Firmado Por	GERMAN LOPEZ PEREZ	Página	1/1
Url De Verificación	https://pfirma.us.es/verifirma/code/IFIg2TLhpaPe4i%2FpCWqeFQ%3D%3D		



GRADO EN QUÍMICA// DOBLE GRADO EN QUÍMICA E INGENIERÍA DE MATERIALES



Facultad de Química

PROPUESTA DE TRABAJO FIN DE GRADO

CURSO ACADÉMICO 2024/2025:

TÍTULO (Español)	Modelado de skutteruditas estabilizadas por alta entropía
TÍTULO (Inglés)	Modelling of high-entropy stabilized skutterudites
DEPARTAMENTO	Química Física
Area de Conocimiento	Química Física
TUTORES (máximo 2) (Indicar categoría)	Antonio M. Márquez Cruz (Catedrático de Universidad) José Javier Plata Ramos (Profesor Titular de Universidad)

En el caso de que el alumno deba realizar el trabajo en una instalación externa a la Facultad de Química, indíquelo:

OBJETIVOS (max. 600 caracteres)


El objetivo principal de este proyecto es el modelado de materiales termoeléctricos de alta entropía, empleando la familia de las escuteruditas como estructura patrón. Para ellos se calcularán distintos indicadores que permitan discernir la sintetizabilidad de una gran variedad de composiciones.

METODOLOGÍA (max. 600 caracteres)


- Estudio avanzado de las técnicas basadas en la Teoría del Funcional de la Densidad, DFT.
- Introducción a los conceptos de convex-hull y estabilidad termodinámica de sólidos.
- Cálculo de poblaciones y probabilidad para analizar factores entrópicos en la síntesis de sólidos desordenados.

VºBº DIRECTOR/A DEPARTAMENTO	PROFESORES TUTORES
FECHA	FECHA
FIRMADO.	FIRMADO

Código Seguro De Verificación	R1lzK5Dlr1sGQoU2j1JBrQ==	Fecha	23/09/2024
Firmado Por	ANTONIO MARCIAL MARQUEZ CRUZ JOSE JAVIER PLATA RAMOS		
Url De Verificación	https://pfirma.us.es/verifirma/code/R1lzK5Dlr1sGQoU2j1JBrQ%3D%3D	Página	1/1



Código Seguro De Verificación	ZVf38aAalIEMscdFFGTTQQ==	Fecha	23/09/2024
Firmado Por	GERMAN LOPEZ PEREZ		
Url De Verificación	https://pfirma.us.es/verifirma/code/ZVf38aAalIEMscdFFGTTQQ%3D%3D	Página	1/1



GRADO EN QUÍMICA// DOBLE GRADO EN QUÍMICA E INGENIERÍA DE MATERIALES



Facultad de Química

PROPUESTA DE TRABAJO FIN DE GRADO

CURSO ACADÉMICO 2024/2025:

TÍTULO (Español)	Procesos de encapsulación de péptidos antimicrobianos en Nanotubos de titanio
TÍTULO (Inglés)	Antimicrobial Peptide Encapsulation Processes in Titanium Nanotubes
DEPARTAMENTO	Química Física
Area de Conocimiento	Química Física
TUTORES (máximo 2) (Indicar categoría)	Victoria Isabel Martin Herrera (Profesor Sustituto Interino) María del Pilar López Cornejo (Catedrático de Universidad)
Se utilizarán distintos Servicios Generales de la Universidad de Sevilla que están ubicados en el CITIUS.	
OBJETIVOS (max. 600 caracteres)	
El objetivo de este trabajo es la preparación y caracterización de encapsulación de péptidos antimicrobianos en Nanotubos de titanio.	
METODOLOGÍA (max. 600 caracteres)	
1.-Leer bibliografía que permita familiarizarse con el tema de trabajo propuesto en el TFG. 2.-Realizar la parte experimental. 3.-Reuniones periódicas para analizar los resultados obtenidos. 4.-Redacción del TFG.	
VºBº DIRECTOR/A DEPARTAMENTO	PROFESORES TUTORES
FECHA	FECHA 21/09/2024
FIRMADO.	FIRMADO Victoria Isabel Martín Herrera y María del Pilar López Cornejo <small>MARTIN HERRERA VICTORIA ISABEL - 28766710N - 28766710N Firmado digitalmente por MARTIN HERRERA VICTORIA ISABEL - 28766710N Fecha: 2024.09.23 13:27:32 +02'00'</small>

Código Seguro De Verificación	Tdk2H1AtrsCs+nuUCMMC3A==	Fecha	23/09/2024	
Firmado Por	MARIA PILAR LOPEZ CORNEJO	Página	1/1	
Url De Verificación	https://pfirma.us.es/verifirma/code/Tdk2H1AtrsCs%2BnuUCMMC3A%3D%3D			

Código Seguro De Verificación	AkfXu9ioYSwYiyARvYAduw==	Fecha	23/09/2024	
Firmado Por	GERMAN LOPEZ PEREZ	Página	1/1	
Url De Verificación	https://pfirma.us.es/verifirma/code/AkfXu9ioYSwYiyARvYAduw%3D%3D			

GRADO EN QUÍMICA// DOBLE GRADO EN QUÍMICA E INGENIERÍA DE MATERIALES



Facultad de Química

PROPUESTA DE TRABAJO FIN DE GRADO

CURSO ACADÉMICO 2024/2025:

TÍTULO (Español)	Estudio de la interacción de material genético con liposomas catiónicos
TÍTULO (Inglés)	Study of the interaction of genetic material with cationic liposomes
DEPARTAMENTO	Química Física
Area de Conocimiento	Química Física
TUTORES (máximo 2) (Indicar categoría)	José Antonio Lebrón Romero (Profesor Ayudante Doctor)

En el caso de que el alumno deba realizar el trabajo en una instalación externa a la Facultad de Química, indíquelo:

Parte del trabajo se realizará en las instalaciones de CITIUS.

OBJETIVOS (max. 600 caracteres)

Optimización de la preparación de los liposomas catiónicos. Estudio de la interacción de ADN con liposomas catiónicos. Caracterización de los sistemas en función de la composición de la membrana lipídica.

METODOLOGÍA (max. 600 caracteres)

1. Búsquedas bibliográficas: Herramientas web, palabras claves, etc.
2. Optimización de la composición de la bicapa lipídica de los liposomas empleados.
3. Estudio experimental de la interacción del ADN con liposomas.
4. Discusión de resultados y redacción de la memoria del TFG.

VºBº DIRECTOR/A DEPARTAMENTO	PROFESORES TUTORES
FECHA	FECHA. 20 DE SEPTIEMBRE DE 2024
FIRMADO. GERMÁN LÓPEZ PÉREZ	FIRMADO José Antonio Lebrón Romero

Código Seguro De Verificación	mPDcKVTR17A11YLFQ59QXg==	Fecha	20/09/2024
Firmado Por	JOSE ANTONIO LEBRON ROMERO		
Url De Verificación	https://pfirma.us.es/verifirma/code/mPDcKVTR17A11YLFQ59QXg%3D%3D		Página 1/1

Código Seguro De Verificación	mGCunwNveIPpt0DL5RKnVw==	Fecha	23/09/2024
Firmado Por	GERMAN LOPEZ PEREZ		
Url De Verificación	https://pfirma.us.es/verifirma/code/mGCunwNveIPpt0DL5RKnVw%3D%3D		Página 1/1

GRADO EN QUÍMICA// DOBLE GRADO EN QUÍMICA E INGENIERÍA DE MATERIALES



Facultad de Química

PROPUESTA DE TRABAJO FIN DE GRADO

CURSO ACADÉMICO 2024/2025:

TÍTULO (Español)	Electroquímica de Metaloporfirinas Inmovilizadas en Electroodos				
TÍTULO (Inglés)	Electrochemistry of Metalloporphyrins Immobilized on Electrodes				
DEPARTAMENTO	Química Física				
Area de Conocimiento	Química Física				
TUTORES (máximo 2) (Indicar categoría)	Juan José Calvente Pacheco (Catedrático de Universidad) Inmaculada Márquez Escudero (Profesor Sustituto Interino)				
En el caso de que el alumno deba realizar el trabajo en una instalación externa a la Facultad de Química, indíquelo:					
OBJETIVOS (max. 600 caracteres)					
<ul style="list-style-type: none">- Estudiar la viabilidad de diferentes tipos de electrodos para inmovilizar metaloporfirinas.- Identificar y cuantificar el posible acoplamiento de la transferencia electrónica interfacial de metaloporfirinas con procesos químicos adicionales.- Correlacionar la respuesta electroquímica con parámetros moleculares.					
METODOLOGÍA (max. 600 caracteres)					
<ul style="list-style-type: none">- Preparación y/o acondicionamiento de diferentes tipos de electrodos, desnudos o modificados químicamente, para la inmovilización de metaloporfirinas.- Caracterización experimental de la respuesta electroquímica de metaloporfirinas con las técnicas de voltametría cíclica y espectroscopía de impedancia electroquímica.- Estudio del efecto del medio en la respuesta electroquímica de metaloporfirinas.- Cuantificación de los parámetros fisicoquímicos de las diferentes etapas electro/químicas que participan en la conversión redox de las metaloporfirinas utilizando tratamientos teóricos.					
VºBº DIRECTOR/A DEPARTAMENTO	PROFESORES TUTORES				
FECHA	FECHA 20/09/2024				
	<table><tr><td>CALVENTE PACHECO JUAN JOSE 25576139R</td><td>Firmado digitalmente por CALVENTE PACHECO JUAN JOSE - 25576139R Fecha: 2024.09.20 16:16:39 +02'00'</td></tr><tr><td>MARQUEZ ESCUADERO INMACULADA - 30225208B</td><td>Firmado digitalmente por MARQUEZ ESCUDERO INMACULADA - 30225208B Fecha: 2024.09.20 18:53:34 +02'00'</td></tr></table>	CALVENTE PACHECO JUAN JOSE 25576139R	Firmado digitalmente por CALVENTE PACHECO JUAN JOSE - 25576139R Fecha: 2024.09.20 16:16:39 +02'00'	MARQUEZ ESCUADERO INMACULADA - 30225208B	Firmado digitalmente por MARQUEZ ESCUDERO INMACULADA - 30225208B Fecha: 2024.09.20 18:53:34 +02'00'
CALVENTE PACHECO JUAN JOSE 25576139R	Firmado digitalmente por CALVENTE PACHECO JUAN JOSE - 25576139R Fecha: 2024.09.20 16:16:39 +02'00'				
MARQUEZ ESCUADERO INMACULADA - 30225208B	Firmado digitalmente por MARQUEZ ESCUDERO INMACULADA - 30225208B Fecha: 2024.09.20 18:53:34 +02'00'				
FIRMADO.	FIRMADO Juan José Calvente Inmaculada Márquez				

Código Seguro De Verificación	xpC9GmYn7hmv9xDvPyF9LA==	Fecha	23/09/2024
Firmado Por	GERMAN LOPEZ PEREZ	Página	1/1
Url De Verificación	https://pfirma.us.es/verifirma/code/xpC9GmYn7hmv9xDvPyF9LA%3D%3D		



GRADO EN QUÍMICA// DOBLE GRADO EN QUÍMICA E INGENIERÍA DE MATERIALES



Facultad de Química

PROPUESTA DE TRABAJO FIN DE GRADO

CURSO ACADÉMICO 2024/2025:

TÍTULO (Español)	Comprobación experimental de la aproximación de la capa de difusión
TÍTULO (Inglés)	Experimental verification of the diffusion layer approach.
DEPARTAMENTO	Química Física
Area de Conocimiento	Química Física
TUTORES (máximo 2) (Indicar categoría)	Julia Álvarez Malmagro (AYD) Francisco Prieto Dapena (TU)

En el caso de que el alumno deba realizar el trabajo en una instalación externa a la Facultad de Química, indíquelo:

OBJETIVOS (max. 600 caracteres)

El objetivo de este trabajo es emplear medidas electroquímicas del sistema redox ferri/ferro que permitan comprobar experimentalmente la aproximación de la capa de difusión

METODOLOGÍA (max. 600 caracteres)

La metodología a emplear incluye métodos y electroquímicos

VºBº DIRECTOR/A DEPARTAMENTO	PROFESORES TUTORES
FECHA	FECHA 19 DE SEPTIEMBRE 2024
FIRMADO.	FIRMADO Julia Álvarez Malmagro Francisco Prieto Dapena

Código Seguro De Verificación	e0hHNezdSCTSCq2oNsWfAg==	Fecha	19/09/2024	
Firmado Por	FRANCISCO PRIETO DAPENA JULIA ALVAREZ MALMAGRO			
Url De Verificación	https://pfirma.us.es/verifirma/code/e0hHNezdSCTSCq2oNsWfAg%3D%3D	Página	1/1	

Código Seguro De Verificación	APaTw40LPT2yKe8rn1/Asw==	Fecha	23/09/2024	
Firmado Por	GERMAN LOPEZ PEREZ			
Url De Verificación	https://pfirma.us.es/verifirma/code/APaTw40LPT2yKe8rn1%2FAsw%3D%3D	Página	1/1	

GRADO EN QUÍMICA// DOBLE GRADO EN QUÍMICA E INGENIERÍA DE MATERIALES



Facultad de Química

PROPUESTA DE TRABAJO FIN DE GRADO

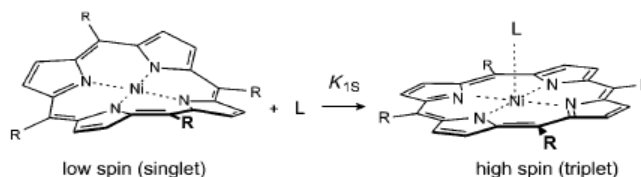
CURSO ACADÉMICO 2024/2025:

TÍTULO (Español)	Estudio teórico del proceso de transición de spin inducida por un cambio de coordinación en porfirinas metálicas en disolución
TÍTULO (Inglés)	Theoretical study of the coordination-induced spin-state switching in metal-porphyrin in solution
DEPARTAMENTO	Química Física
Area de Conocimiento	Química Física
TUTORES (máximo 2) (Indicar categoría)	Carmen Jiménez Calzado (Catedrática de Universidad) Rocío Sánchez de Armas (Profesora Titular de Universidad)

En caso de que el alumno deba realizar el trabajo en una instalación externa a la Facultad de Química, indíquelo:

OBJETIVOS (max. 600 caracteres)

Algunas porfirinas metálicas presentan un proceso conocido como transición de spin inducida por un cambio en la coordinación, en la que el centro metálico cambia su número de coordinación por asociación con uno o dos ligandos en las posiciones axiales, a la vez que cambia de estado de spin. El proceso ha sido mayoritariamente observado en disolución y caracterizado mediante distintas técnicas experimentales. En este proyecto se va a estudiar mediante cálculos mecano cuánticos el proceso de asociación del ligando a una porfirina de Ni(II), determinando las entalpías y entropías de reacción para distintos ligandos, analizando el posible efecto del disolvente sobre la reacción.



El proceso ha sido mayoritariamente observado en disolución y caracterizado mediante distintas técnicas experimentales. En este proyecto se va a estudiar mediante cálculos mecano cuánticos el proceso de asociación del ligando a una porfirina de Ni(II), determinando las entalpías y entropías de reacción para distintos ligandos, analizando el posible efecto del disolvente sobre la reacción.

METODOLOGÍA (max. 600 caracteres)

Se llevarán a cabo cálculos teóricos basados en la teoría del funcional de la densidad (DFT) para determinar la estructura electrónica, geometrías y energías relativas de las distintas especies. Se usarán los paquetes Gaussian 09 con la interfaz GaussView, ambos empleados en las prácticas de Química Física II.

VºBº DIRECTOR/A DEPARTAMENTO

PROFESORES TUTORES

FECHA

FECHA 20. SEPTIEMBRE 2024

FIRMADO.

FIRMADO

C. Jiménez Calzado, R. Sánchez de Armas

JIMENEZ CALZADO MARIA CARMEN - 80137847M
Firmado digitalmente por JIMENEZ CALZADO MARIA CARMEN - 80137847M
Fecha: 2024.09.20 17:47:24 +02'00'

SANCHEZ DE ARMAS MARIA DEL ROCIO - 77806935M
Firmado digitalmente por SANCHEZ DE ARMAS MARIA DEL ROCIO - 77806935M
Fecha: 2024.09.20 14:52:30 +02'00'

Código Seguro De Verificación

Ia4jM1/+fNqpFmOHmbuEQQ==

Fecha

23/09/2024

Firmado Por

GERMAN LOPEZ PEREZ

Url De Verificación

<https://pfirma.us.es/verifirma/code/Ia4jM1%2F%2BfNqpFmOHmbuEQQ%3D%3D>

Página

1/1



GRADO EN QUÍMICA// DOBLE GRADO EN QUÍMICA E INGENIERÍA DE MATERIALES



Facultad de Química

PROPUESTA DE TRABAJO FIN DE GRADO

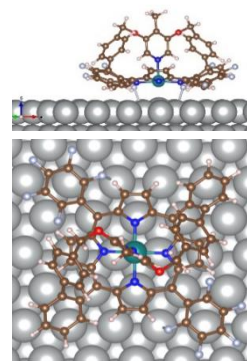
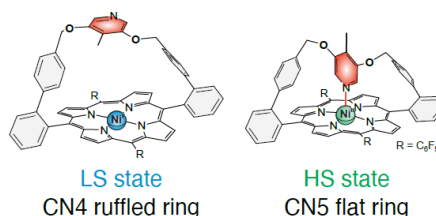
CURSO ACADÉMICO 2024/2025:

TÍTULO (Español)	Estudio teórico del proceso de transición de spin inducida por un cambio de coordinación en porfirinas depositadas en una superficie metálica
TÍTULO (Inglés)	Theoretical study of the coordination-induced spin-state switching in metal-porphyrin deposited in a metal surface
DEPARTAMENTO	Química Física
Area de Conocimiento	Química Física
TUTORES (máximo 2) (Indicar categoría)	Rocío Sánchez de Armas (Profesora Titular de Universidad) Carmen Jiménez Calzado (Catedrática de Universidad)

En caso de que el alumno deba realizar el trabajo en una instalación externa a la Facultad de Química, indíquelo:

OBJETIVOS (max. 600 caracteres)

Algunas porfirinas metálicas presentan un proceso conocido como transición de spin inducida por un cambio en la coordinación, en la que el centro metálico cambia su número de coordinación por asociación con uno o dos ligandos en las posiciones axiales, a la vez que cambia de estado de spin. El proceso ha sido mayoritariamente observado en disolución, aunque recientemente se ha observado también para moléculas aisladas depositadas en superficies metálicas. En este proyecto se va a estudiar este proceso mediante cálculos mecano cuánticos de una porfirina de Ni(II) depositada en una superficie de Ag(111), analizando la estructura electrónica, sitios de adsorción y estabilidad relativa de las distintas especies.



METODOLOGÍA (max. 600 caracteres)

Se llevarán a cabo cálculos teóricos basados en la teoría del funcional de la densidad (DFT) con el código VASP para determinar la estructura electrónica, geometrías y energías relativas de las distintas especies soportadas en la superficie del metal.

VºBº DIRECTOR/A DEPARTAMENTO

FECHA

PROFESORES TUTORES

FECHA 20. SEPTIEMBRE 2024

JIMENEZ
CALZADO
MARIA CARMEN
- 80137847M
Firmado digitalmente
por JIMENEZ CALZADO
MARIA CARMEN -
80137847M
Fecha: 2024.09.20
17:48:26 +02'00'

SANCHEZ DE
ARMAS MARIA
DEL ROCIO -
77806935M
Firmado digitalmente
por SANCHEZ DE
ARMAS MARIA DEL
ROCIO - 77806935M
Fecha: 2024.09.20
14:53:26 +02'00'

FIRMADO.

FIRMADO

C. Jiménez Calzado, R. Sánchez de Armas

Código Seguro De Verificación	omCngElktzqvWMuGhfPTSsw==	Fecha	23/09/2024
Firmado Por	GERMAN LOPEZ PEREZ	Página	1/1
Url De Verificación	https://pfirma.us.es/verifirma/code/omCngElktzqvWMuGhfPTSsw%3D%3D		

