

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



Facultad de Química

PROPUESTA DE TRABAJO FIN DE GRADO

CURSO ACADÉMICO 2025/2026:

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 03/07/2025				
FIRMADO.	<table><tr><td>MARTINEZ FERNANDEZ JOSE MANUEL - 75435608R</td><td>Firmado digitalmente por MARTINEZ FERNANDEZ JOSE MANUEL - 75435608R Fecha: 2025.07.03 13:04:20 +02'00'</td><td>OVIEDO LOPEZ JAIME - 31657735Y</td><td>Firmado digitalmente por OVIEDO LOPEZ JAIME - 31657735Y Fecha: 2025.07.04 11:28:20 +02'00'</td></tr></table>	MARTINEZ FERNANDEZ JOSE MANUEL - 75435608R	Firmado digitalmente por MARTINEZ FERNANDEZ JOSE MANUEL - 75435608R Fecha: 2025.07.03 13:04:20 +02'00'	OVIEDO LOPEZ JAIME - 31657735Y	Firmado digitalmente por OVIEDO LOPEZ JAIME - 31657735Y Fecha: 2025.07.04 11:28:20 +02'00'
MARTINEZ FERNANDEZ JOSE MANUEL - 75435608R	Firmado digitalmente por MARTINEZ FERNANDEZ JOSE MANUEL - 75435608R Fecha: 2025.07.03 13:04:20 +02'00'	OVIEDO LOPEZ JAIME - 31657735Y	Firmado digitalmente por OVIEDO LOPEZ JAIME - 31657735Y Fecha: 2025.07.04 11:28:20 +02'00'		

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



Facultad de Química

PROPUESTA DE TRABAJO FIN DE GRADO

CURSO ACADÉMICO 2025/2026:

TÍTULO (Español)	Optimización de la síntesis de liposomas conteniendo fosfolípidos que difieren en estructura y función.
TÍTULO (Inglés)	Optimization of the synthesis of liposomes containing phospholipids differing in structure and function.
DEPARTAMENTO	Química Física
Area de Conocimiento	Química Física
TUTORES (máximo 2) (Indicar categoría)	María Luisa Moyá Morán (Prof. Catedrática) Eva Bernal Pérez (Prof. Ayudante Doctora)
En el caso de que el alumno deba realizar el trabajo en una instalación externa a la Facultad de Química, indíquelo: El alumno deberá de realizar la caracterización de los nanosistemas en las instalaciones del CITIUS.	
OBJETIVOS (max. 600 caracteres)	
Optimización de la síntesis de liposomas de fosfatidilcolina y fosfatidilserina con diferente composición. Caracterización de los sistemas lipídicos preparados. Estudio de la influencia de la estructura de los fosfolípidos mencionados en la estructura del liposoma y en el proceso de encapsulación de un fármaco hidrofóbico.	
METODOLOGÍA (max. 600 caracteres)	
1. Búsquedas bibliográficas: Herramientas web, palabras claves, etc. 2. Optimización de la composición de la bicapa lipídica de los liposomas preparados. 3. Estudio de la encapsulación de un fármaco hidrofóbico en los liposomas preparados. 4. Discusión de resultados y redacción de la memoria del TFG.	
VºBº DIRECTOR/A DEPARTAMENTO	PROFESORES TUTORES
FECHA	FECHA 14/07/2025
FIRMA: María Luisa Moyá Morán y Eva Bernal Pérez	

Código Seguro De Verificación	9ca1B5f7ztaLGSKDNrVu6w==	Fecha	15/07/2025
Firmado Por	EVA BERNAL PEREZ MARIA LUISA MOYA MORAN		
Url De Verificación	https://pfirma.us.es/verifirma/code/9ca1B5f7ztaLGSKDNrVu6w%3D%3D	Página	1/1



Código Seguro De Verificación	6eLRC6jIVSwdVFfUTtAmtw==	Fecha	17/07/2025
Firmado Por	GERMAN LOPEZ PEREZ		
Url De Verificación	https://pfirma.us.es/verifirma/code/6eLRC6jIVSwdVFfUTtAmtw%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 2025/2026:capsumaci

TÍTULO (Español)	Optimización de la síntesis de sistemas nanométricos de multicapas para la encapsulación de los fármacos ciclosporina y voriconazol
TÍTULO (Inglés)	Optimising the synthesis of nanometric multilayer systems for the encapsulation of the drugs cyclosporine and voriconazole
DEPARTAMENTO	Química Física
Area de Conocimiento	Química Física
TUTORES (máximo 2) (Indicar categoría)	María del Pilar López Cornejo (Prof. Catedrática) Francisco José Ostos Marcos (Prof. Ayudante Doctor)
En el caso de que el alumno deba realizar el trabajo en una instalación externa a la Facultad de Química, indíquelo: El alumno deberá de realizar la caracterización de los nanosistemas en las instalaciones del CITIUS.	
OBJETIVOS (max. 600 caracteres)	
Preparación, optimización y caracterización nanosistemas lipídicos y/o poliméricos de multicapas. Estudio de la encapsulación de los fármacos ciclosporina y voriconazol.	
METODOLOGÍA (max. 600 caracteres)	
1. Búsquedas bibliográficas: Herramientas web, palabras claves, etc. 2. Síntesis y caracterización de nanoestructuras de multicapas con diversa composición. 3. Encapsulación de los fármacos ciclosporina y voriconazol en las nanoestructuras sintetizadas. Estudio de la sinergia de ambos fármacos en cultivos fúngicos. 4. Discusión de resultados y redacción de la memoria del TFG.	
VºBº DIRECTOR/A DEPARTAMENTO	PROFESORES TUTORES
FECHA	FECHA 14/07/2025
	FIRMA: M. Pilar López Corneo. Francisco José Ostos Marcos

Código Seguro De Verificación	8sMPmRDggPqIAzttAIZ0pA==	Fecha	14/07/2025
Firmado Por	FRANCISCO JOSE OSTOS MARCOS MARIA PILAR LOPEZ CORNEJO		
Url De Verificación	https://pfirma.us.es/verifirma/code/8sMPmRDggPqIAzttAIZ0pA%3D%3D	Página	1/2



Código Seguro De Verificación	M4tt8jWmC88Q/Qj4Ltw8nQ==	Fecha	17/07/2025
Firmado Por	GERMAN LOPEZ PEREZ		
Url De Verificación	https://pfirma.us.es/verifirma/code/M4tt8jWmC88Q%2FQj4Ltw8nQ%3D%3D	Página	1/2



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

Código Seguro De Verificación	8sMPmRDggPqIAzttAIZ0pA==	Fecha	14/07/2025
Firmado Por	FRANCISCO JOSE OSTOS MARCOS MARIA PILAR LOPEZ CORNEJO		
Url De Verificación	https://pfirma.us.es/verifirma/code/8sMPmRDggPqIAzttAIZ0pA%3D%3D	Página	2/2



Código Seguro De Verificación	M4tt8jWmC88Q/Qj4Ltw8nQ==	Fecha	17/07/2025
Firmado Por	GERMAN LOPEZ PEREZ		
Url De Verificación	https://pfirma.us.es/verifirma/code/M4tt8jWmC88Q%2FQj4Ltw8nQ%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 2025/2026:

TÍTULO (Español)	Estudio de la interacción de la proteína BSA con aminoarcillas de diversos cationes
TÍTULO (Inglés)	Study of the interaction of BSA protein with aminoclays of different cations
DEPARTAMENTO	Química Física
Area de Conocimiento	Química Física
TUTORES (máximo 2) (Indicar categoría)	María del Pilar López Cornejo (Catedrática) José Antonio Lebrón Romero (Ayudante Doctor)
En el caso de que el alumno deba realizar el trabajo en una instalación externa a la Facultad de Química, indíquelo: El alumno deberá de realizar la caracterización de los nanosistemas en las instalaciones del CITIUS.	
OBJETIVOS (max. 600 caracteres)	
Síntesis de aminoarcillas preparadas con diversos cationes. Caracterización de las aminoarcillas sintetizadas. Estudio de la interacción de BSA con las distintas aminoarcillas preparadas.	
METODOLOGÍA (max. 600 caracteres)	
1. Búsquedas bibliográficas: Herramientas web, palabras claves, etc. 2. Optimización de la síntesis de aminoarcillas conteniendo diversos cationes. 3. Estudio experimental de la interacción de BSA con las aminoarcillas sintetizadas. 4. Discusión de resultados y redacción de la memoria del TFG.	
VºBº DIRECTOR/A DEPARTAMENTO	PROFESORES TUTORES
FECHA	FECHA 14/07/2025
FIRMADO.	FIRMADO Mª del Pilar López Cornejo José Antonio Lebrón Romero

Código Seguro De Verificación	teJDyLQoisZTk2LssWz05A==	Fecha	14/07/2025
Firmado Por	JOSE ANTONIO LEBRON ROMERO MARIA PILAR LOPEZ CORNEJO		
Url De Verificación	https://pfirma.us.es/verifirma/code/teJDyLQoisZTk2LssWz05A%3D%3D	Página	1/2



Código Seguro De Verificación	27jwkc4dKS4LZ8d9CXyraw==	Fecha	17/07/2025
Firmado Por	GERMAN LOPEZ PEREZ		
Url De Verificación	https://pfirma.us.es/verifirma/code/27jwkc4dKS4LZ8d9CXyraw%3D%3D	Página	1/2



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

Código Seguro De Verificación	teJDyLQoisZTk2LssWz05A==	Fecha	14/07/2025	
Firmado Por	JOSE ANTONIO LEBRON ROMERO MARIA PILAR LOPEZ CORNEJO			
Url De Verificación	https://pfirma.us.es/verifirma/code/teJDyLQoisZTk2LssWz05A%3D%3D	Página	2/2	

Código Seguro De Verificación	27jwkc4dKS4LZ8d9Cxyraw==		Fecha	17/07/2025	
Firmado Por	GERMAN LOPEZ PEREZ				
Url De Verificación	https://pfirma.us.es/verifirma/code/27jwkc4dKS4LZ8d9Cxyraw%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

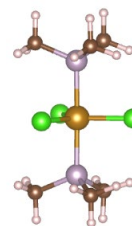
CURSO ACADÉMICO 2025/2026:

TÍTULO (Español)	Estudio teórico de la deposición de complejos Fe(III)–TBP en superficies de Au(111)
TÍTULO (Inglés)	Theoretical study of the deposition of Fe(III)–TBP complexes on Au(111) surfaces
DEPARTAMENTO	Química Física
Area de Conocimiento	Química Física
TUTORES (máximo 2) (Indicar categoría)	Rocío Sánchez de Armas (Profesora Titular de Universidad) Nicolás Montenegro Pohlhammer (Contrato Acceso)

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

OBJETIVOS (max. 600 caracteres)

El $(\text{PMe}_3)_2\text{FeCl}_3$ es un complejo de Fe(III) con propiedades interesantes como imán monomolecular (*single-molecule magnet*, SMM). Presenta 3 posibles estados de spin, con $S=1/2$, $S=3/2$ y $S=5/2$, de los cuales el estado intermedio es el más estable. Sus propiedades magnéticas sólo han sido estudiadas en el cristal, y pueden verse modificadas tras la deposición del complejo sobre un sustrato para su integración en distintas aplicaciones. En este proyecto se realizará un estudio teórico de la deposición del complejo sobre la superficie de Au(111) y se analizará el efecto de la adsorción sobre la estructura electrónica y las propiedades magnéticas del mismo.



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

MONTENEGRO
POHLHAMMER
NICOLAS EDUAR
- Z2614880S
Date: 2025.07.14 15:29:49
+02'00'

Digitally signed by
MONTENEGRO
POHLHAMMER NICOLAS
EDUAR - Z2614880S
Date: 2025.07.14 15:29:49
+02'00'

SANCHEZ DE
ARMAS MARIA DEL
ROCIO -
77806935M

Firmado digitalmente por
SANCHEZ DE ARMAS MARIA
DEL ROCIO - 77806935M
Fecha: 2025.07.14 15:32:20
+02'00'

FIRMADO.

FIRMADO R. Sánchez de Armas, N. Montenegro Pohlhammer

Código Seguro De Verificación	W50CYrijgr9CgNab1qFHkg==	Fecha	17/07/2025
Firmado Por	GERMAN LOPEZ PEREZ	Página	1/1
Url De Verificación	https://pfirma.us.es/verifirma/code/W50CYrijgr9CgNab1qFHkg%3D%3D		





Facultad de Química

PROPUESTA DE TRABAJO FIN DE GRADO

CURSO ACADÉMICO 2025/2026:

	Estudio Teórico de la Complejación de Iones Radioactivos en Medios Marinos
TÍTULO (Inglés)	Theoretical Study of the Complexation of Radioactive Cations in Seawater
DEPARTAMENTO	Química Física
Area de Conocimiento	
TUTORES (máximo 2) (Indicar categoría)	Enrique Sánchez Marcos (catedrático de universidad)
OBJETIVOS (max. 600 caracteres)	
La contaminación de metales radioactivos en el medio ambiente es esencialmente antropogénica, debido a pruebas nucleares, o accidentes como los de Three Mile Island (EEUU), Chernobyl (Rusia) y Fukushima (Japón). Esto ha conllevado la presencia de iones radioactivos en las aguas marinas. El estudio experimental de la química en disolución en estos medios es difícil dada la baja concentración de estos iones. En este trabajo se abordará un estudio mecano-cuántico del conjunto de complejaciones y grados de hidrólisis de los acuoiones de algunos actínidos, bien en su forma de monocatión o actinila, con los aniones más abundantes de las aguas marinas. Se examinará la estabilidad relativa de los distintos complejos en disolución. Caracterizadas sus estructuras se buscarán relaciones entre éstas y las formas de los espectros de absorción de rayos X, EXAFS y XANES a que dan lugar, lo que constituye una de las formas más efectivas para su identificación y caracterización.	
METODOLOGÍA (max. 600 caracteres)	
Para llevar a cabo este proyecto se emplearán programas de química cuántica, en concreto los códigos Gaussian-16 y ORCA6, 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 serán obtenidos mediante el programa FEFF10. 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.	
VºBº DIRECTOR/A DEPARTAMENTO	PROFESORES TUTORES
FECHA 15 DE JULIO DE 2025	FECHA 15 DE JULIO DE 2025
FIRMADO. GERMÁN LÓPEZ PÉREZ	FIRMADO. Enrique Sánchez Marcos

Código Seguro De Verificación	BwU0XF6vKCLZcYn872UrUg==	Fecha	14/07/2025
Firmado Por	ENRIQUE SANCHEZ MARCOS		
Url De Verificación	https://pfirma.us.es/verifirma/code/BwU0XF6vKCLZcYn872UrUg%3D%3D	Página	1/1



Código Seguro De Verificación	bEud1fjQdJp1Ph8zEYeVKA==	Fecha	17/07/2025
Firmado Por	GERMAN LOPEZ PEREZ		
Url De Verificación	https://pfirma.us.es/verifirma/code/bEud1fjQdJp1Ph8zEYeVKA%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 2025/2026:

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)	
- 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)	
- 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 a día de la firma
	CALVENTE PACHECO JUAN JOSE 25576139R Firmado digitalmente por CALVENTE PACHECO JUAN JOSE - 25576139R Fecha: 2025.07.04 16:13:40 +02'00' MARQUEZ ESCUDERO INMACULADA - 30225208B Firmado digitalmente por MARQUEZ ESCUDERO INMACULADA - 30225208B Fecha: 2025.07.05 22:37:43 +02'00'
FIRMADO.	FIRMADO Juan José Calvente Inmaculada Márquez

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



Facultad de Química

PROPUESTA DE TRABAJO FIN DE GRADO

CURSO ACADÉMICO 2025/2026:

TÍTULO (Español)	Construcción y Caracterización de electrodos basados en un MOF de Níquel derivado
TÍTULO (Inglés)	Construction and Characterization of Nickel derived MOF-based Electrodes
DEPARTAMENTO	Química Física
Area de Conocimiento	Química Física
TUTORES (máximo 2) (Indicar categoría)	José Luis Olloqui Sariego (Profesor Titular)

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)

- Preparar electrodos modificados con un MOF de Níquel.
- Evaluar el efecto del potencial en la reconstrucción del MOF depositado.
- Caracterizar la respuesta electroquímica y la actividad electrocatalítica del electrodo preparado.

METODOLOGÍA LA RESPUESTA ELECTROQUÍMICA (max. 600 caracteres)

- Optimización del protocolo de reconstrucción del MOF de Níquel.
- Caracterización estructural del material reconstruido.
- Caracterización de la respuesta electroquímica y electrocatalítica del material inmovilizado sobre electrodos, utilizando la técnica de voltamperometría cíclica y líneal.

VºBº DIRECTOR/A DEPARTAMENTO	PROFESORES TUTORES
FECHA	FECHA 11/07/2025
FIRMADO.	OLLOQUI SARIEGO JOSE LUIS - 28764655G Firmado digitalmente por OLLOQUI SARIEGO JOSE LUIS - 28764655G Fecha: 2025.07.11 15:42:30 +02'00'
FIRMADO.	FIRMADO

Código Seguro De Verificación	8VvtXkdMk68Xo7YAm1h0eA==	Fecha	17/07/2025
Firmado Por	GERMAN LOPEZ PEREZ	Página	1/1
Url De Verificación	https://pfirma.us.es/verifirma/code/8VvtXkdMk68Xo7YAm1h0eA%3D%3D		



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



Facultad de Química

PROPUESTA DE TRABAJO FIN DE GRADO

CURSO ACADÉMICO 2025/2026:

TÍTULO (Español)	Caracterización Electroquímica de Electrodos Modificados con Derivados de Polímeros de Coordinación Porosos Bimetálicos
TÍTULO (Inglés)	Electrochemical Characterization of Electrodes Modified with Bimetallic Metal-Organic Framework (MOF)-derived
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)

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)

- Preparar electrodos modificados con un material derivado de un polímero de coordinación poroso bimetálico (MOF).
- Caracterizar la respuesta electroquímica del electrodo modificado.
- Caracterizar la respuesta electrocatalítica del electrodo modificado para reacciones de interés.

METODOLOGÍA (max. 600 caracteres)

- Optimización del protocolo de inmovilización del derivado de MOF bimetálico sobre diferentes tipos de electrodos de carbón.
- Caracterización de la respuesta electroquímica del derivado de MOF bimetálico inmovilizado sobre electrodos en medio alcalino empleando la técnica de voltamperometría cíclica.
- Caracterización y cuantificación de la respuesta electrocatalítica utilizando las técnicas de voltamperometría cíclica y voltamperometría de pulso diferencial.

VºBº DIRECTOR/A DEPARTAMENTO

PROFESORES TUTORES

FECHA

FECHA a día de la firma

FIRMADO.

FIRMADO José Luis Olloqui Inmaculada Márquez

OLLOQUI
SARIEGO
JOSE LUIS -
28764655G

Firmado digitalmente
por OLLOQUI
SARIEGO JOSE LUIS -
28764655G
Fecha: 2025.07.09
12:05:54 +02'00'

MARQUEZ
ESCUERO
INMACULADA -
30225208B

Firmado digitalmente
por MARQUEZ
ESCUERO
INMACULADA -
30225208B
Fecha: 2025.07.09
16:42:31 +02'00'

Código Seguro De Verificación	KGnWqgt7RaEdlywfpcfBmg==	Fecha	17/07/2025
Firmado Por	GERMAN LOPEZ PEREZ		
Url De Verificación	https://pfirma.us.es/verifirma/code/KGnWqgt7RaEdlywfpcfBmg%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 2025/2026:

TÍTULO (Español)	Cálculo teórico de espectros ^1H RMN en moléculas orgánicas con equilibrios conformacionales.
TÍTULO (Inglés)	Theoretical calculation of ^1H NMR spectra in organic molecules with conformational equilibria.
DEPARTAMENTO	Química Física
Area de Conocimiento	Química Física
TUTORES (máximo 2) (Indicar categoría)	Rafael Rodríguez Pappalardo
OBJETIVOS (max. 600 caracteres)	
- Estudiar el equilibrio conformacional de una o varias moléculas orgánicas con identificación y caracterización de sus conformeros estables mediante métodos de búsqueda automatizada. - Calcular los desplazamientos químicos de ^1H de cada conformero usando métodos DFT. - Evaluar el espectro teórico ponderado por población y compararlo con datos experimentales. - Estimar el efecto del disolvente en el equilibrio conformacional y en el espectro RMN.	
METODOLOGÍA (max. 600 caracteres)	
- Se utilizarán herramientas automáticas para la exploración del espacio conformacional como CREST y GOAT usando métodos semiempíricos o campos de fuerza. - Para los conformeros relevantes se optimizarán sus geometrías y se calcularán sus desplazamientos químicos de ^1H y constantes de acoplamiento mediante DFT utilizando el programa ORCA. - Se empleará un modelo de disolvente (COSMO o CPCM) para simular efectos del medio. - Uso de herramientas de IA para generar scripts Python que permitan la obtención de espectros teóricos mediante ponderación de los espectros individuales de los conformeros.	
VºBº DIRECTOR/A DEPARTAMENTO	PROFESORES TUTORES
FECHA	FECHA 7 de julio de 2025
FIRMADO.	FIRMADO. Rafael Rodríguez Pappalardo

Código Seguro De Verificación	9CcPLKH+he/TJxU69+wrPQ==	Fecha	05/07/2025	
Firmado Por	RAFAEL RODRIGUEZ PAPPALARDO			
Url De Verificación	https://pfirma.us.es/verifirma/code/9CcPLKH%2Bhe%2FTJxU69%2BwrPQ%3D%3D	Página	1/1	

Código Seguro De Verificación	tfz0/AQNf2Y50n1Wjr5lXg==	Fecha	17/07/2025	
Firmado Por	GERMAN LOPEZ PEREZ			
Url De Verificación	https://pfirma.us.es/verifirma/code/tfz0%2FAQNf2Y50n1Wjr5lXg%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 2025/2026:

TÍTULO (Español)	Estructura electronica de skutteruditas de CoSb_3 dopadas con Fe y Ni.
TÍTULO (Inglés)	Electronic Structure of CoSb_3 skutterudite doped with Fe and Ni.
DEPARTAMENTO	Química Física
Area de Conocimiento	Química Física
TUTORES (máximo 2) (Indicar categoría)	Antonio M. Márquez Cruz José Javier Plata Ramos
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)	
- Entender conceptos básicos relacionadas con estructura electrónica en sólidos. - Familiarizarse con la metodología que fundamenta la Teoría del Funcional de la Densidad (DFT) - Aplicar estos conocimientos al estudio de skutteruditas dopadas.	
METODOLOGÍA (max. 600 caracteres)	
Para cumplir los objetivos expuestos se propone la siguiente metodología durante la realización del TFG: - Estudio guiado de conceptos aplicados a estructura electrónica de sólidos y su combinación con técnicas computacionales. - Introducción a conceptos básicos relacionados con el DFT	
VºBº DIRECTOR/A DEPARTAMENTO	PROFESORES TUTORES
FECHA	FECHA
FIRMADO.	FIRMADO

Código Seguro De Verificación	kgS9uS9IABvaUhzPdsVU+w==	Fecha	09/07/2025	
Firmado Por	JOSE JAVIER PLATA RAMOS ANTONIO MARCIAL MARQUEZ CRUZ			
Url De Verificación	https://pfirma.us.es/verifirma/code/kgS9uS9IABvaUhzPdsVU%2Bw%3D%3D	Página	1/1	

Código Seguro De Verificación	Zkceu2v+mhGne2Mb4Sp4pQ==	Fecha	17/07/2025	
Firmado Por	GERMAN LOPEZ PEREZ			
Url De Verificación	https://pfirma.us.es/verifirma/code/Zkceu2v%2BmhGne2Mb4Sp4pQ%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 2025/2026:

TÍTULO (Español)	Estudio de la sintetizabilidad de calcogenuros metálicos de alta entropía combinando DFT y métodos "high-throughput"
TÍTULO (Inglés)	Exploring the synthesizability of high-entropy metallic chalcogenides combining DFT and high-throughput calculations.
DEPARTAMENTO	Química Física
Area de Conocimiento	Química Física
TUTORES (máximo 2) (Indicar categoría)	Antonio M. Márquez Cruz José Javier Plata Ramos

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)

- Entender el concepto de sólido estabilizado por alta entropía.
- Familiarizarse con la metodología que fundamenta la Teoría del Funcional de la Densidad (DFT)
- Adquirir destrezas básicas en el uso de técnicas "high-throughput" a través de programación en lenguaje Python.
- Aplicar estos conocimientos al estudio de calcogenuros metálicos estabilizados por alta entropía.

METODOLOGÍA (max. 600 caracteres)

Para cumplir los objetivos expuestos se propone la siguiente metodología durante la realización del TFG:

- Estudio guiado de conceptos termodinámicos aplicados a sólidos y su combinación con técnicas computacionales.
- Introducción a conceptos básicos relacionados con el DFT
- Introducción al uso de técnicas "high-throughput" y el empleo del lenguaje Python.

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

Código Seguro De Verificación	wV/MYn+pR3RvU6B4vwcTjQ==	Fecha	09/07/2025
Firmado Por	JOSE JAVIER PLATA RAMOS ANTONIO MARCIAL MARQUEZ CRUZ		
Url De Verificación	https://pfirma.us.es/verifirma/code/wV%2FMYn%2BpR3RvU6B4vwcTjQ%3D%3D	Página	1/1



Código Seguro De Verificación	692FXtj0E6LTf4ivp0xusQ==	Fecha	17/07/2025
Firmado Por	GERMAN LOPEZ PEREZ		
Url De Verificación	https://pfirma.us.es/verifirma/code/692FXtj0E6LTf4ivp0xusQ%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 2025/2026:

TÍTULO (Español)	Estudio de la sintetizabilidad de skutteruditas de alta entropía combinando DFT y métodos "high-throughput"
TÍTULO (Inglés)	Exploring the synthesizability of high-entropy skutterudites combining DFT and high-throughput calculations.
DEPARTAMENTO	Química Física
Area de Conocimiento	Química Física
TUTORES (máximo 2) (Indicar categoría)	Elena Rodríguez Remesal José Javier Plata Ramos

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)

- Entender el concepto de sólido estabilizado por alta entropía.
- Familiarizarse con la metodología que fundamenta la Teoría del Funcional de la Densidad (DFT)
- Adquirir destrezas básicas en el uso de técnicas "high-throughput" a través de programación en lenguaje Python.
- Aplicar estos conocimientos al estudio de skutteruditas estabilizados por alta entropía.

METODOLOGÍA (max. 600 caracteres)

Para cumplir los objetivos expuestos se propone la siguiente metodología durante la realización del TFG:

- Estudio guiado de conceptos termodinámicos aplicados a sólidos y su combinación con técnicas computacionales.
- Introducción a conceptos básicos relacionados con el DFT
- Introducción al uso de técnicas "high-throughput" y el empleo del lenguaje Python.

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

Código Seguro De Verificación	17Tq52faZtJ2/XHNveFh/A==	Fecha	09/07/2025
Firmado Por	JOSE JAVIER PLATA RAMOS ELENA RODRIGUEZ REMESAL		
Url De Verificación	https://pfirma.us.es/verifirma/code/17Tq52faZtJ2%2FXHNveFh%2FA%3D%3D	Página	1/1



Código Seguro De Verificación	EvWwBQnXJ40WpgcsuEDlIA==	Fecha	17/07/2025
Firmado Por	GERMAN LOPEZ PEREZ		
Url De Verificación	https://pfirma.us.es/verifirma/code/EvWwBQnXJ40WpgcsuEDlIA%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 2025/2026:

TÍTULO (Español)	Efectos del medio en los procesos de decoloración de indicadores colorimétricos
TÍTULO (Inglés)	Medium effects on the fading processes of colorimetric indicators.
DEPARTAMENTO	Química Física
Area de Conocimiento	Química Física
TUTORES (máximo 2) (Indicar categoría)	Domingo González Arjona (CU) Germán 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)	
Los indicadores colorimétricos (fenolftaleína, verde de malaquita y otros) son especies utilizadas en los métodos volumétricos para detectar el punto final de una valoración. La reacción de decoloración de estas sustancias son procesos muy interesantes para ser empleados como sistemas modelos y para ilustrar conceptos básicos en el ámbito de la cinética y termodinámica química. Estas reacciones de decoloración se encuentran afectadas por diferentes factores (pH, electrolito soporte, temperatura, disolventes, ...) que pueden modificar las características cinéticas de los mismos, provocando cambios importantes en las velocidades de reacción.	
METODOLOGÍA (max. 600 caracteres)	
Se propone investigar cómo afectan algunos factores presentes en el medio de reacción (pH, electrolitos de fondo, disolventes, ...) a la cinética de decoloración de estos compuestos. Puesto que se trata de sustancias fuertemente coloreadas, se propone realizar medidas espectrofotométricas en el rango UV-Visible para obtener los datos cinéticos. Los resultados obtenidos se analizarán en base a modelos fisicoquímicos (termodinámicos y cinéticos) para establecer las propiedades fundamentales de estos mecanismos de reacción y como afectan dichos factores al proceso global.	
VºBº DIRECTOR/A DEPARTAMENTO	PROFESORES TUTORES
FECHA 17/07/2025	FECHA 17/07/2025
FIRMADO. GERMAN LOPEZ PEREZ	FIRMADO: Domingo González Arjona FIRMADO: Germán López Pérez

Código Seguro De Verificación	hSa0bjw38bCxXdK0mfdH7w==	Fecha	17/07/2025
Firmado Por	GERMAN LOPEZ PEREZ DOMINGO GONZALEZ ARJONA		
Url De Verificación	https://pfirma.us.es/verifirma/code/hSa0bjw38bCxXdK0mfdH7w%3D%3D	Página	1/1



Código Seguro De Verificación	49eMo52DEveBuRPztC066w==	Fecha	17/07/2025
Firmado Por	GERMAN LOPEZ PEREZ		
Url De Verificación	https://pfirma.us.es/verifirma/code/49eMo52DEveBuRPztC066w%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 2025/2026:

TÍTULO (Español)	Estudio de la interacción de ADN con liposomas catiónicos conteniendo DOTAP
TÍTULO (Inglés)	Study of the interaction of DNA with cationic liposomes containing DOTAP
DEPARTAMENTO	Química Física
Area de Conocimiento	Química Física
TUTORES (máximo 2) (Indicar categoría)	Eva Bernal Pérez (Prof. Ayudante Doctora) Victoria Isabel Martín Herrera (Prof. Sustituta Interina)
En el caso de que el alumno deba realizar el trabajo en una instalación externa a la Facultad de Química, indíquelo: El alumno deberá de realizar la caracterización de los nanosistemas en las instalaciones del CITIUS.	
OBJETIVOS (max. 600 caracteres) Preparación y optimización de la síntesis de liposomas catiónicos de diversa composición conteniendo DOTAP. Caracterización de los sistemas lipídicos preparados. Estudio de la interacción de ADN con los sistemas lipídicos de DOTAP.	
METODOLOGÍA (max. 600 caracteres) 1. Búsquedas bibliográficas: Herramientas web, palabras claves, etc. 2. Síntesis y caracterización de liposomas de DOTAP con diversa composición. 3. Estudio de la interacción de ADN con los liposomas preparados. 4. Discusión de resultados y redacción de la memoria del TFG.	
PROFESORES TUTORES	
VºBº DIRECTOR/A DEPARTAMENTO	
FECHA	FECHA 14/07/2025
FIRMA: Victoria Isabel Martín Herrera y Eva Bernal Pérez	

Código Seguro De Verificación	ccZm1+oxXdrVLZPX3hQucQ==	Fecha	14/07/2025	
Firmado Por	Victoria Isabel Martin Herrera EVA BERNAL PEREZ			
Url De Verificación	https://pfirma.us.es/verifirma/code/ccZm1%2BoxXdrVLZPX3hQucQ%3D%3D	Página	1/1	

Código Seguro De Verificación	qJBfP9uU3iV1STUozFY+Uw==	Fecha	17/07/2025	
Firmado Por	GERMAN LOPEZ PEREZ			
Url De Verificación	https://pfirma.us.es/verifirma/code/qJBfP9uU3iV1STUozFY%2BUw%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 2025/2026:

TÍTULO (Español)	Películas lipídicas planas como modelo de membranas biológicas
TÍTULO (Inglés)	Lipid planar films as a model for biological membranes
DEPARTAMENTO	Química Física
Area de Conocimiento	Química Física
TUTORES (máximo 2) (Indicar categoría)	Julia Álvarez Malmagro (Contratado Doctor) Francisco Prieto Dapena (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)

Caracterización fisicoquímica de membranas lipídicas en presencia de compuestos de interés farmacológico o biológico, mediante el empleo de películas lipídicas planas (monocapas y /o bicapas)

METODOLOGÍA (max. 600 caracteres)

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

VºBº DIRECTOR/A DEPARTAMENTO

PROFESORES TUTORES

FECHA

FECHA: 15 DE JULIO DE 2025

FIRMADO.

FIRMADO

Código Seguro De Verificación	SRxdfowq2QcrSSxZVTsqpQ==	Fecha	15/07/2025
Firmado Por	FRANCISCO PRIETO DAPENA JULIA ALVAREZ MALMAGRO		
Url De Verificación	https://pfirma.us.es/verifirma/code/SRXdfowq2QcrSSxZVTsqpQ%3D%3D	Página	1/1



Código Seguro De Verificación	fzAGo/YthNcXho8DUCwonQ==	Fecha	17/07/2025
Firmado Por	GERMAN LOPEZ PEREZ		
Url De Verificación	https://pfirma.us.es/verifirma/code/fzAGo%2FYthNcXho8DUCwonQ%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 2025/2026:

TÍTULO (Español)	Caracterización de bicapas lipídicas flotantes sobre electrodos
TÍTULO (Inglés)	Characterization of floating lipid bilayers on electrodes
DEPARTAMENTO	Química Física
Area de Conocimiento	Química Física
TUTORES (máximo 2) (Indicar categoría)	Julia Álvarez Malmagro (Contratado Doctor) Francisco Prieto Dapena (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)

Preparación de bicapas lipídicas flotantes sobre electrodos sólidos. Caracterización electroquímica, estableciendo rango de potenciales de estabilidad, comportamiento dieléctrico, formación de defectos.

METODOLOGÍA (max. 600 caracteres)

La metodología a emplear incluye métodos de preparación bicapas lipídicas mediante fusión de vesículas. Aplicación de métodos electroquímicos.

VºBº DIRECTOR/A DEPARTAMENTO	PROFESORES TUTORES
FECHA	FECHA: 15 DE JULIO DE 2025
FIRMADO.	FIRMADO

Código Seguro De Verificación	smsgqhhY8qFNadyrVEwg9A==	Fecha	15/07/2025	
Firmado Por	FRANCISCO PRIETO DAPENA JULIA ALVAREZ MALMAGRO			
Url De Verificación	https://pfirma.us.es/verifirma/code/smsgqhhY8qFNadyrVEwg9A%3D%3D	Página	1/1	

Código Seguro De Verificación	RSHMkuzPlPy4L73fa8tWRA==	Fecha	17/07/2025	
Firmado Por	GERMAN LOPEZ PEREZ			
Url De Verificación	https://pfirma.us.es/verifirma/code/RSHMkuzPlPy4L73fa8tWRA%3D%3D	Página	1/1	