



UNIVERSIDAD
DE GRANADA

PROPUESTA DE TRABAJO FIN DE GRADO

GRADO EN QUÍMICA

CURSO 2020/2021



Facultad de Ciencias

PROPUESTA DEL DEPARTAMENTO

DATOS BÁSICOS DEL TFG

| | | | |
|---------------------------|------------------|--------------------------|----|
| TÍTULO TFG | Teoría de grafos | | |
| CÓDIGO TFG ⁽¹⁾ | GT-20/21-01 | TIPOLOGÍA ⁽²⁾ | A1 |

⁽¹⁾ A rellenar por la dirección del dpto

| | | |
|--------------|-----------------------------------------------------------|-------------------------------------|
| OFERTADO POR | Profesor del Departamento | <input checked="" type="checkbox"/> |
| | Profesor del Departamento junto con Empresa o Institución | <input type="checkbox"/> |

DATOS DE LA ENTIDAD (donde se va a realizar el TFG)

| | | | |
|----------------------------------------------|-----------------------------------------------------|------|-------|
| CENTRO (Departamento, institución o empresa) | Departamento de Geometría y Topología | | |
| DIRECCIÓN POSTAL | Facultad de Ciencias, Avenida de Fuente Nueva, s/n. | | |
| LOCALIDAD | Granada | C.P. | 18071 |

DATOS DEL TUTOR

| | | | |
|------------------------------------------------------------------------------------------|----------------------------|--------|-----------------|
| TUTOR 1 (Tutor académico en caso de realizar el TFG en una empresa o institución) | | | |
| NOMBRE Y APELLIDOS | José Antonio Gálvez López | | |
| DEPARTAMENTO | Geometría y Topología | | |
| CARGO ⁽³⁾ | Catedrático de Universidad | | |
| TELÉFONO | 958243245 | E-MAIL | jagalvez@ugr.es |

Rellenar en caso de haber un segundo tutor

| | | | |
|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--|--------|--|
| TUTOR 2 | | | |
| NOMBRE Y APELLIDOS | | | |
| DEPARTAMENTO | | | |
| CARGO ⁽³⁾ | | | |
| TELÉFONO | | E-MAIL | |
| TUTOR DE LA EMPRESA O INSTITUCIÓN (Rellenar en caso de realizar el TFG en una empresa o institución) | | | |
| NOMBRE Y APELLIDOS | | | |
| EMPRESA | | | |
| TITULACIÓN | | | |
| TELÉFONO | | E-MAIL | |

⁽³⁾ Catedrático, Profesor Titular, Profesor Contratado Doctor,....

MEMORIA DE LA PROPUESTA DE TFG

Introducción.

En este TFG se pretende estudiar la teoría matemática de grafos y entender cómo esto se aplica a la representación de diferentes objetos químicos como moléculas, reacciones, cristales, polímeros...

Se estudiarán algunos conceptos matemáticos como arcos simples, curvas poligonales, grafos y árboles. Posteriormente se estudiarán grafos planos y el teorema de Kuratowski, así como las representaciones matriciales de grafos.

Todo lo anterior se usará para definir el concepto de grafo químico y la topología molecular. Se estudiarán grafos de Hückel y de Kekulé. Se desarrollará la teoría de los grafos polihexagonales y benzenoidales, y finalmente se estudiarán los grafos con peso.

Objetivos.

El objetivo principal de este trabajo es hacer una introducción a la teoría de grafos químicos, desarrollando algunos conocimientos matemáticos básicos para su comprensión y entender su relación con diferentes problemas en Química como la representación de moléculas o polímeros, la nomenclatura de compuestos químicos, la enumeración de isómeros...

Resumen de los trabajos a realizar por el estudiante/Plan de trabajo.

A lo largo de la realización de la memoria el alumno tendrá reuniones periódicas con el tutor para indicarle qué conceptos y resultados debe ir estudiando, qué libros de la bibliografía debe usar para ello y explicarle algunos detalles preliminares necesarios para su comprensión. Una vez hecho el estudio de cada una de las partes el alumno aprovechará estas reuniones periódicas para preguntar las dudas que haya ido acumulando en su estudio.

Para afianzar la comprensión de cada parte del trabajo, el alumno irá redactando todo lo estudiado y pasará las notas al tutor para que éste las corrija y haga las aclaraciones que estime oportunas a la luz de lo expuesto en dicha redacción.

Cuando el estudio haya finalizado el alumno entregará una memoria final al tutor para su corrección y le hará una exposición de lo aprendido a través de todo el trabajo.

Una vez cumplimentado deberá ser enviado junto con el resto de propuestas del departamento en formato pdf al correo: gradoquimica@ugr.es. El nombre de cada fichero debe de coincidir con el código del TFG.

TIPOLOGÍA⁽²⁾

A. Trabajos de investigación con orientación básica o aplicada, cuya temática se relacione con los contenidos de la titulación, como:

- A1.** Estudio de casos, teóricos o prácticos, relacionados con la temática del Grado, a partir de material ya disponible en los Centros.
- A2.** Trabajos experimentales, de toma de datos de campo, de laboratorio, etc.
- A3.** Elaboración de guías prácticas relacionadas con la temática del Grado.

B. Trabajos científico-técnicos representativos del ejercicio profesional para el que capacita la titulación, como:

- B1.** Elaboración de un informe o un proyecto de naturaleza profesional.
- B2.** Elaboración de un plan de empresa.
- B3.** Simulación de encargos profesionales.

En ambas modalidades el TFG no podrá tener carácter exclusivamente bibliográfico, pero si podrá ser teórico, experimental, o combinación de éstos.