



UNIVERSIDAD
DE GRANADA

PROPUESTA DE TRABAJO FIN DE GRADO
GRADO EN QUÍMICA
CURSO 2019/2020



Facultad de Ciencias

PROPUESTA DEL DEPARTAMENTO

DATOS BÁSICOS DEL TFG

TÍTULO TFG	Teoría de grafos		
CÓDIGO TFG	GT-19/20-01		
TIPOLOGÍA	A1	Nº ALUMNOS	1
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
TELÉFONO	958248927	E-MAIL	dirgeometria@ugr.es

DATOS DEL TUTOR

TUTOR 1 (<i>Tutor académico en caso de realizar el TFG en una empresa o institución</i>)			
APELLIDOS, NOMBRE	Gálvez López, José Antonio		
DEPARTAMENTO	Geometría y Topología		
CARGO (*)	Catedrático de Universidad		
TELÉFONO	958243245	E-MAIL	jagalvez@ugr.es
TUTOR 2 (<i>Rellenar en caso de haber un segundo tutor</i>)			
APELLIDOS, NOMBRE			
DEPARTAMENTO			
CARGO (*)			
TELÉFONO		E-MAIL	
TUTOR DE LA EMPRESA O INSTITUCIÓN (<i>Rellenar en caso de realizar el TFG en una empresa o institución</i>)			
APELLIDOS, NOMBRE			
EMPRESA			
TITULACIÓN			
TELÉFONO		E-MAIL	

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

Una vez cumplimentado y firmado 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.

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.

Fecha prevista comienzo: 16/09/2019

Duración prevista (meses): 9

Fecha: 16 de mayo de 2019

FIRMAS

DIRECTOR DEL DEPARTAMENTO	DIRECTOR DE LA INSTITUCIÓN/EMPRESA
Fdo.: Francisco Urbano Pérez-Aranda	Fdo.: _____
TUTOR 1/TUTOR ACADÉMICO	TUTOR 2/TUTOR DE LA INSTITUCIÓN/EMPRESA
Fdo.: José Antonio Gálvez López	Fdo.: _____