



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	Simulaciones de dinámica molecular de sistemas químicos		
CÓDIGO TFG ⁽¹⁾	QF-20/21-13	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 Química Física, Universidad de Granada		
DIRECCIÓN POSTAL	Facultad de Ciencias, Avd. Fuentenueva sn		
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	Sánchez Ruíz, José Manuel		
DEPARTAMENTO	Química Física		
CARGO ⁽³⁾	Catedrático		
TELÉFONO	958 243189	E-MAIL	sanchezr@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.

Los científicos Martin Karplus, Michael Levitt y Arieh Warshel fueron galardonados en 2013 con el Nobel en Química por el desarrollo de procedimientos computacionales para el estudio de sistemas químicos complejos.

Objetivos.

Tomando como punto de partida sus discursos de aceptación del citado premio y llevando a cabo la revisión bibliográfica pertinente, el alumno realizará un estudio de las contribuciones más relevantes de dichos autores al campo de la química computacional.

Un segundo objetivo implica la instalación por parte del alumno en un ordenador de programas de cálculos de dinámica molecular (NAMD) así como programas de visualización de trayectorias de dinámica molecular (VMD).

Además, llevará a cabo estudios computacionales de dinámica molecular sobre distintas proteínas y analizará el efecto de mutaciones sobre la dinámica de aquellas.

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

Una primera parte de búsqueda bibliográfica de los trabajos más relevantes de Karplus, Levitt y Warshel y de sus implicaciones en el campo de la química computacional.

En la segunda parte, el alumno instalará y aprenderá el manejo del programas de cálculo de dinámica molecular (NAMD) y de visualización de trayectorias de dinámica molecular (VMD). Se llevarán a cabo cálculos de dinámica molecular de diferentes proteínas de interés así como de un número de mutantes de las mismas.

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.