



UNIVERSIDAD
DE GRANADA

PROPUESTA DE TRABAJO FIN DE GRADO

GRADO EN QUÍMICA

CURSO 2022/2023



Facultad de Ciencias

PROPUESTA DEL DEPARTAMENTO/EMPRESA

DATOS BÁSICOS DEL TFG

TÍTULO TFG	El teorema de deficiencia cero		
CÓDIGO TFG ⁽¹⁾	MA-22-23-01	TIPOLOGÍA ⁽²⁾	A1

⁽¹⁾ A rellenar por la dirección del dpto que vendrá dado como: código del dpto-Nº de orden

⁽²⁾ Al final del documento se encuentran las diferentes tipologías

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 Matemática Aplicada		
DIRECCIÓN POSTAL ⁽³⁾	Sección de Matemáticas, Campus de Fuentenueva		
LOCALIDAD ⁽³⁾	Granada	C.P. ⁽³⁾	18071

⁽³⁾ A rellenar en el caso de realizarse en una empresa

DATOS DEL TUTOR

TUTOR 1 (Tutor académico en caso de realizar el TFG en una empresa o institución)			
NOMBRE Y APELLIDOS	Juan Calvo Yagüe		
DEPARTAMENTO	Matemática Aplicada		
CARGO ⁽⁴⁾	Profesor titular		
TELÉFONO	43192	E-MAIL	juancalvo@ugr.es

Rellenar en caso de haber un segundo tutor

TUTOR 2			
NOMBRE Y APELLIDOS			
DEPARTAMENTO			
CARGO ⁽⁴⁾			
TELÉFONO		E-MAIL	
TUTOR DE LA EMPRESA O INSTITUCIÓN (Rellenar en caso de realizar el TFG en una empresa o institución)			
NOMBRE Y APELLIDOS			
TITULACIÓN			
TELÉFONO		E-MAIL	

⁽⁴⁾ Catedrático, Profesor Titular, Profesor Contratado Doctor,....

MEMORIA DE LA PROPUESTA DE TFG

Introducción.

La teoría de redes de reacciones químicas (chemical reaction network theory) combina el estudio de la cinética química con el uso de herramientas matemáticas provenientes de la teoría de grafos y las técnicas de sistemas dinámicos. Desde su inicio en los años 60, esta teoría ha permitido un punto de vista abstracto sobre el comportamiento de varias especies químicas acopladas, independiente de las constantes de reacción. A partir de la estequiometría de las reacciones bajo estudio, es posible establecer resultados sobre el número de equilibrios posibles, su estabilidad o la posible presencia de comportamientos periódicos (e.g. la reacción de Belousov-Zhabotinsky).

Objetivos.

En este trabajo se pretende que el alumno conecte sus conocimientos sobre cinética química adquiridos durante la titulación con el punto de vista de la chemical reaction network theory. Para ello se habrá de familiarizar con sus nociones y técnicas básicas. Una vez el alumno adquiera la suficiente destreza con esta teoría estará preparado para entender y aplicar uno de los resultados más importantes de la misma: el zero deficiency theorem.

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

Utilizaremos como fuente principal la monografía de Martin Feinberg, Foundations of Chemical Reaction Network Theory (Springer 2019). El alumno estudiará los capítulos más básicos de la misma y comparará el punto de vista allí expuesto con el que ha adquirido con anterioridad en la titulación. Para ello será necesario que se familiarice con adecuadas técnicas de teoría de grafos y sistemas dinámicos, que posiblemente no le sean familiares. Una vez consolidado este bagaje, el alumno podrá pasar a estudiar el zero deficiency theorem y a buscar ejemplos tratados anteriormente en la titulación en los cuáles el citado resultado se puede aplicar.

Una vez cumplimentado deberá ser enviado junto con el resto de las propuestas del departamento en formato pdf (Word transformado en pdf, NO escaneado) 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.

C. Trabajos bibliográficos (**C**)