



# GRADO EN INGENIERÍA DE MATERIALES

Curso 2026-27

## Ficha de Trabajo de Fin de Grado

<b>Departamento:</b>	Química Física (Fac. CC. Químicas)
<b>Título:</b>	Reciclado de polimeros asistido por CO2 supercrítico
<b>Title:</b>	Polymer recycling assisted by supercritical CO2
<b>Tutor/es:</b>	Albertina Cabañas Poveda, Eduardo Pérez Velilla
<b>E-mail tutor/es:</b>	alber@ucm.es; eperezv@ucm.es
<b>Número de plazas:</b>	1
<b>Tipo de TFG:</b>	Experimental <input checked="" type="checkbox"/> Bibliográfico <input type="checkbox"/> Simulación <input type="checkbox"/>
<b>Asignación de TFG:</b>	Asignación por expediente

### Objetivos:

Realización de experimentos de reciclado de materiales plásticos utilizando CO<sub>2</sub> supercrítico (a T y P por encima de T<sub>c</sub> = 31 °C, P<sub>c</sub> = 73 bar). Se utilizarán procedimientos descritos en la bibliografía.

Los objetivos específicos son:

- Comprender el uso de CO<sub>2</sub> supercrítico en el reciclado de plásticos.
- Estudiar el efecto del CO<sub>2</sub> supercrítico sobre polímeros y composites.
- Aplicar metodologías experimentales de reciclado con CO<sub>2</sub> supercrítico.
- Evaluar la eficacia del tratamiento supercrítico en materiales poliméricos.
- Caracterizar los materiales antes y después del tratamiento.

### Metodología:

Los ensayos se realizan en autoclaves de alta presión de acero inoxidable. El estudiante aprenderá los protocolos de trabajo en estas condiciones.

El material tratado se caracterizará utilizando ATG, DSC, FTIR y otras técnicas analíticas estándar como GC, NMR,...

### Bibliografía:

M. Chanda, Advanced Industrial and Engineering Polymer Research 4 (2021) 133-150

<https://www.feique.org/pdfs/reciclado-quimico-en-espana.pdf>

J., Praveenkumara et al. Sustainable recycling technologies for thermoplastic polymers and their composites: A review of the state of the art, Polymer Composites, 43(9),

<https://doi.org/10.1002/pc.27000>

R.J. Olmos-Greco, E. Pérez, L. Calvo, A. Cabañas, Sustainable delamination of multilayer plastic films for advanced recycling, J. Supercrit. Fluids, 229, 2026.



# GRADO EN INGENIERÍA DE MATERIALES

Curso 2026-27

## Ficha de Trabajo de Fin de Grado

<b>Departamento:</b>	Química Física (Fac. CC. Químicas)
<b>Título:</b>	Síntesis y caracterización de nanopartículas de oro
<b>Title:</b>	Synthesis and characterization of gold nanoparticles
<b>Tutor/es:</b>	Andrés Guerrero Martínez y Guillermo González Rubio
<b>E-mail tutor/es:</b>	aguerrero@quim.ucm.es y ggrubio@ucm.es
<b>Número de plazas:</b>	1
<b>Tipo de TFG:</b>	Experimental <input checked="" type="checkbox"/> Bibliográfico <input type="checkbox"/> Simulación <input type="checkbox"/>
<b>Asignación de TFG:</b>	Asignación por expediente

### Objetivos:

- 1) Sintetizar nanopartículas coloidales de oro de diversos tamaños.
- 2) Utilizar técnicas espectroscópicas de caracterización de nanopartículas coloidales de oro.
- 3) Usar técnicas de microscopía electrónica de transmisión para la caracterización de nanopartículas coloidales de oro.
- 4) Aprender a buscar y analizar bibliografía científica.
- 5) Instruirse en la escritura de un texto científico.

### Metodología:

Para el desarrollo del Trabajo Fin de Grado se utilizarán metodologías conocidas de síntesis coloidal de nanopartículas de oro basada en el método de crecimiento de semillas, en presencia de agentes tensioactivos, estudiando las distintas variables experimentales que afectan al tamaño y forma de las nanopartículas de oro.

Una vez sintetizadas, las propiedades ópticas de las nanopartículas serán caracterizadas a través de espectroscopía ultravioleta-visible, y sus morfologías serán analizadas a través de microscopía electrónica de transmisión.

### Bibliografía:

ACS Nano 2019, 13, 4424–4435



# GRADO EN INGENIERÍA DE MATERIALES

Curso 2026-27

## Ficha de Trabajo de Fin de Grado

<b>Departamento:</b>	Química Física (Fac. CC. Químicas)
<b>Título:</b>	Estudio teórico de las propiedades conductoras de dicalcogenuros
<b>Title:</b>	Theoretical study of dichalcogenides conductive properties
<b>Tutor/es:</b>	Cristina Díaz Blanco
<b>E-mail tutor/es:</b>	crdiaz08@ucm.es
<b>Número de plazas:</b>	1
<b>Tipo de TFG:</b>	Experimental <input type="checkbox"/> Bibliográfico <input type="checkbox"/> Simulación <input checked="" type="checkbox"/>
<b>Asignación de TFG:</b>	Asignación por expediente

### Objetivos:

- Estudiar la estructura electrónica de materiales dicalcogenuros bidimensionales.
- Analizar las bandas de energías y asignar el carácter conductor, semiconductor o aislante de cada material.
- Analizar la dispersión fonónica y el efecto sobre la misma de defectos en la estructura electrónica.

### Metodología:

- Estudio de los antecedentes bibliográficos
- Realizar simulaciones de estructura eléctrica, usando la teoría del funcional de la densidad, DFT, para estudiar propiedades físicas de materiales dicalcogenuros seleccionados usando condiciones de contorno periódicas.
- Las simulaciones se realizarán usando un código 'open source'

### Bibliografía:

- Q. H. Wang et al. Nat. Nanotechnol. 7, 699 (2012)
- S. Manzeli et al. Nat. Rev. Matter. 2, 17033 (2017)
- P. Grant et al. Materials Today 27, 8 (2019)
- M. Pisarra et al. Phys. Rev. B 103, 195416 (2021)



# GRADO EN INGENIERÍA DE MATERIALES

Curso 2026-27

## Ficha de Trabajo de Fin de Grado

<b>Departamento:</b>	Química Física (Fac. CC. Químicas)
<b>Título:</b>	Ensamblaje de coloides blandos en interfases fluidas
<b>Title:</b>	Assembly of soft colloids at fluid interfaces
<b>Tutor/es:</b>	Eduardo Guzmán Solís
<b>E-mail tutor/es:</b>	eguzmans@ucm.es
<b>Número de plazas:</b>	1
<b>Tipo de TFG:</b>	Experimental <input checked="" type="checkbox"/> Bibliográfico <input type="checkbox"/> Simulación <input type="checkbox"/>
<b>Asignación de TFG:</b>	Asignación por expediente

### Objetivos:

El TFG tiene como objetivo analizar en profundidad los mecanismos fisicoquímicos que gobiernan el ensamblaje de coloides blandos en interfases fluidas, poniendo especial atención a cómo las propiedades intrínsecas de las partículas condicionan su adsorción y organización en la interfase. Se pretende caracterizar experimentalmente la interacción entre las partículas y la interfase, evaluando la cinética y termodinámica de adsorción, así como los cambios estructurales que experimentan los coloides al acomodarse en un entorno interfacial. A partir de estas observaciones, el proyecto busca describir cómo se forman monocapas, agregados o redes interfaciales, identificando los factores que determinan la transición entre distintos modos de ensamblaje.

### Metodología:

La metodología consistirá en seleccionar microgeles adecuados mediante una breve revisión bibliográfica y estudiar su comportamiento en la interfase aire-agua. Los microgeles se adsorberán en la interfase aire-agua para analizar su ensamblaje bajo condiciones controladas de concentración, pH y fuerza iónica. La caracterización interfacial se realizará mediante tensiometría para seguir la evolución de la tensión superficial durante la adsorción, reometría interfacial para determinar la elasticidad y viscosidad de la película formada y microscopía óptica o de fluorescencia para observar la organización lateral de los microgeles en la interfaz. Con estos datos se evaluará cómo las propiedades de los microgeles influyen en su capacidad de formar monocapas estables en la interfase aire-agua.

### Bibliografía:

Eduardo Guzmán, Armando Maestro. Soft Colloidal Particles at Fluid interfaces. *Polymers* 14 (2022) 1133.

Brent S. Murray. Microgels at fluid-fluid interfaces for food and drinks. *Advances in Colloid and Interface Science* 271 (2019) 101990.

Steffen Bochenek, Fabrizio Camerin, Emanuela Zaccarelli, Armando Maestro, Maximilian M. Schmidt, Walter Richtering, Andrea Scotti. In-situ study of the impact of temperature and architecture on the interfacial structure of microgels. *Nature Communications* 13 (2022) 3744.



# GRADO EN INGENIERÍA DE MATERIALES

Curso 2026-27

## Ficha de Trabajo de Fin de Grado

<b>Departamento:</b>	Química Física (Fac. CC. Químicas)
<b>Título:</b>	Cristales de espín: teoría, dinámica y control cuántico
<b>Title:</b>	Spin glasses: theory, dynamics and quantum control
<b>Tutor/es:</b>	Ignacio Solá Reija, Juan José Omiste Romero
<b>E-mail tutor/es:</b>	isola@quim.ucm.es , jomiste@ucm.es
<b>Número de plazas:</b>	1
<b>Tipo de TFG:</b>	Experimental <input type="checkbox"/> Bibliográfico <input type="checkbox"/> Simulación <input checked="" type="checkbox"/>
<b>Asignación de TFG:</b>	Asignación por expediente

### Objetivos:

1. Estudio de los cristales de espín y su importancia para la ciencia de materiales, con especial énfasis en su aplicación a la computación cuántica.
2. Aplicación de los conceptos de la mecánica cuántica a los cristales de espín. Obtención de los estados propios y resolución de la ecuación de Schrödinger.
3. Introducción a las técnicas de control óptimo cuántico mediante campos externos.
4. Aplicación de control óptimo cuántico para maximizar la magnetización de regiones concretas del cristal y preparación de estados entrelazados.
5. Análisis del transporte de espín a lo largo de la cadena.

### Metodología:

1. Estudio bibliográfico de cristales de espín: descripción cuántica, tipos de modelos, principales propiedades y métodos de simulación.
2. Aprendizaje de técnicas de control óptimo cuántico: teoría e implementación.
3. Familiarización con el código de simulación.
4. Aplicación del código de simulación para simular la dinámica cuántica así como el control óptimo de magnitudes de interés, tales como la magnetización.

### Bibliografía:

1. Mbeng, G. B., Russomanno, A., & Santoro, G. E. (2024). The quantum Ising chain for beginners. *SciPost Physics Lecture Notes*, 82. <https://doi.org/10.21468/SciPostPhysLectNotes.82>
2. Werschnik, J., & Gross, E. K. U. (2007). Quantum optimal control theory. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, 40(18), R175–R211.
3. Heule, R., Bruder, C., Burgarth, D., & Stojanović, V. M. (2010). Local quantum control of Heisenberg spin chains. *Physical Review*



# GRADO EN INGENIERÍA DE MATERIALES

Curso 2026-27

## Ficha de Trabajo de Fin de Grado

<b>Departamento:</b>	Química Física (Fac. CC. Químicas)
<b>Título:</b>	Diseño y optimización de anticuerpos en terapias oncológicas de precisión
<b>Title:</b>	Design and optimization of antibodies in precision oncology therapeutics
<b>Tutor/es:</b>	Jorge Reñé Espinosa y Andres Tejedor Reyes
<b>E-mail tutor/es:</b>	jorgerene@ucm.es y andretej@ucm.es
<b>Número de plazas:</b>	1
<b>Tipo de TFG:</b>	Experimental <input type="checkbox"/> Bibliográfico <input type="checkbox"/> Simulación <input checked="" type="checkbox"/>
<b>Asignación de TFG:</b>	Asignación por expediente

### Objetivos:

Diseñar y optimizar la secuencia de un anticuerpo dirigido a receptores específicos de membrana en células tumorales de ovario y pulmón mediante métodos computacionales y sistemas de predicción estructural de proteínas basadas en IA. Establecer el mecanismo de interacción del anticuerpo con el receptor sobreexpresado en células tumorales.

### Metodología:

Se emplearán simulaciones atomísticas y modelos de grano grueso combinados con métodos de predicción estructural de proteínas tipo AlphaFold, ColabFold y RFDiffusion. Se utilizará un software de Dinámica Molecular, GROMACS, combinado con una plataforma multiescala para el cálculo de afinidad y especificidad entre anticuerpo y receptor.

### Bibliografía:

Bennett et al., Nature, 649, 183, 2026.  
Watson et al., Nature, 620, 1089, 2023.  
Llombart et al., bioRxiv, 10.64898/2026.03.13.711720, 2026.



# GRADO EN INGENIERÍA DE MATERIALES

Curso 2026-27

## Ficha de Trabajo de Fin de Grado

<b>Departamento:</b>	Química Física (Fac. CC. Químicas)
<b>Título:</b>	Desarrollo y validación de un método computacional para constantes de acoplamiento en RMN de proteínas y materiales moleculares
<b>Title:</b>	Development and validation of a computational method for NMR coupling constants in proteins and molecular materials
<b>Tutor/es:</b>	Reynier Suardíaz
<b>E-mail tutor/es:</b>	reysuard@ucm.es
<b>Número de plazas:</b>	1
<b>Tipo de TFG:</b>	Experimental <input type="checkbox"/> Bibliográfico <input type="checkbox"/> Simulación <input checked="" type="checkbox"/>
<b>Asignación de TFG:</b>	Asignación por expediente

### Objetivos:

Desarrollar un flujo de cálculo automatizado en Python para la obtención de constantes de acoplamiento escalar.

Aplicar métodos de Teoría del Funcional de la Densidad a sistemas modelo de proteínas y materiales moleculares.

Extraer y analizar constantes de acoplamiento a partir de resultados de química cuántica.

Validar los resultados mediante comparación con datos experimentales de la literatura.

### Metodología:

Se desarrollará un flujo computacional en Python para la extracción, tratamiento y análisis de datos de constantes de acoplamiento en Resonancia Magnética Nuclear, con aplicación al refinamiento de estructuras 3D de proteínas y biomateriales moleculares. Los datos se obtendrán mediante cálculos de simulación molecular basados en DFT y se validarán mediante comparación con datos experimentales de la literatura.

### Bibliografía:

R. Suardíaz, R. Crespo-Otero, C. Pérez, J. San Fabián, J. M. García de la Vega; Communication: Accurate determination of side-chain torsion angle  $\chi_1$  in proteins: Phenylalanine residues. *J. Chem. Phys.* 14, 2011; 134 (6): 061101.

J. San Fabián, S. Omar, and J. M. García de la Vega; Computational Protocol to Evaluate Side-Chain Vicinal Spin-Spin Coupling Constants and Karplus Equation in Amino Acids: Alanine Dipeptide Model, *Journal of Chemical Theory and Computation*, 15 (7), 2019, 4252-4263