



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	Estudio teórico de propiedades magnéticas en compuestos polinucleares de cobre(II)		
CÓDIGO TFG <sup>(1)</sup>	QI-19/20-08	TIPOLOGÍA <sup>(2)</sup>	A1

<sup>(1)</sup> 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)	Facultad de Ciencias Departamento de Química Inorgánica		
DIRECCIÓN POSTAL	Avda. Fuentenueva s/n		
LOCALIDAD	Granada	C.P.	18002

#### DATOS DEL TUTOR

<b>TUTOR 1 (Tutor académico en caso de realizar el TFG en una empresa o institución)</b>			
NOMBRE Y APELLIDOS	MOTA ÁVILA, ANTONIO JOSÉ		
DEPARTAMENTO	Química Inorgánica		
CARGO <sup>(3)</sup>	Profesor Titular de Universidad		
TELÉFONO	958248595	E-MAIL	mota@ugr.es

Rellenar en caso de haber un segundo tutor

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

<sup>(3)</sup> Catedrático, Profesor Titular, Profesor Contratado Doctor,....

## MEMORIA DE LA PROPUESTA DE TFG

### Introducción.

Uno de los retos en el cálculo de constantes de acoplamiento magnético en compuestos polinucleares es el caso del cobre(II). Aunque la predicción del signo (acoplamiento antiferro- o ferromagnético) es bastante fiable, no sucede lo mismo con el valor absoluto de dicho acoplamiento, existiendo algunas discrepancias entre el valor calculado experimentalmente y el teórico. Nos proponemos aquí realizar un estudio sistemático que nos permita calcular dichas constantes de una forma más precisa.

### Objetivos.

- Conexiones a equipos remotos
- Conocimiento de LINUX básico
- Manejo de programas de Química Cuántica
- Comprensión y análisis de los resultados
- Estudio topológico de constantes de acoplamiento magnético
- Evaluación teórica de las constantes de acoplamiento magnético en compuestos polinucleares de Cu(II)

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

1. El estudiante deberá familiarizarse con el manejo de diferentes programas: protocolo de intercambio de ficheros, mecánica molecular, ab initio.
2. Cálculo de constantes de acoplamiento magnético: topología
3. Envío de trabajos para el cálculo de las constantes de acoplamiento a partir de compuestos de la base de datos cristalográfica de Cambridge.
4. Generación de un informe final

---

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

---

## TIPOLOGÍA<sup>(2)</sup>

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.