



UNIVERSIDAD
DE GRANADA

PROPUESTA DE TRABAJO FIN DE GRADO

GRADO EN QUÍMICA

CURSO 2021/2022



Facultad de Ciencias

PROPUESTA DEL DEPARTAMENTO/EMPRESA

DATOS BÁSICOS DEL TFG

TÍTULO TFG	Estudio teórico de propiedades espectroscópicas y topología de oxo- y nitrocarbonos		
CÓDIGO TFG ⁽¹⁾	QI-21/22-20	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 Química Inorgánica. Facultad de Ciencias. Universidad de Granada		
DIRECCIÓN POSTAL ⁽³⁾			
LOCALIDAD ⁽³⁾		C.P. ⁽³⁾	

⁽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	Antonio José MOTA ÁVILA		
DEPARTAMENTO	Química Inorgánica		
CARGO ⁽⁴⁾	Profesor Titular		
TELÉFONO	958 248595	E-MAIL	mota@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.

Los oxo- y nitrocarbonos son compuestos poco estudiados en el grado y merecen una atención especial dada su exótica naturaleza. El estudio comprende un análisis de estabilidad en función de la topología así como de sus propiedades espectroscópicas (IR, UV-visible, RMN, etc.). Todo ello puede ser evaluado de forma teórica, sirviendo como apoyo predictivo de las propiedades de este tipo de sistemas.

Objetivos.

- Conexiones a equipos remotos
- Conocimiento de LINUX básico
- Manejo de programas de Química Cuántica
- Comprensión y análisis de los resultados
- Estudio conformacional de moléculas sencillas
- Evaluación teórica de propiedades espectroscópicas en las moléculas de interés

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, programas de representación molecular y de cálculo ab-initio.
2. Envío de trabajos para el cálculo de conformaciones, análisis y poblaciones
3. Envío de trabajos para el cálculo de propiedades moleculares, análisis y tabulación
4. Generación de un informe final

Una vez cumplimentado deberá ser enviado junto con el resto de las 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.

C. Trabajos bibliográficos (C)