



UNIVERSIDAD  
DE GRANADA

## PROPUESTA DE TRABAJO FIN DE GRADO

GRADO EN QUÍMICA

CURSO 2023/2024



Facultad de Ciencias

### PROPUESTA DEL DEPARTAMENTO/EMPRESA

#### DATOS BÁSICOS DEL TFG

TÍTULO TFG	Análisis de propiedades quirópticas utilizando TD-DFT		
CÓDIGO TFG <sup>(1)</sup>	QO-23-24-01	TIPOLOGÍA <sup>(2)</sup>	A1

<sup>(1)</sup> A rellenar por la dirección del dpto que vendrá dado como: código del dpto-Nº de orden (p.e.: QA-01)

<sup>(2)</sup> 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 Orgánica		
DIRECCIÓN POSTAL <sup>(3)</sup>	Facultad de Ciencias, Campus Fuentenueva		
LOCALIDAD <sup>(3)</sup>	Granada	C.P. <sup>(3)</sup>	18017

<sup>(3)</sup> A rellenar en el caso de realizarse en una empresa

#### DATOS DEL TUTOR

<b>TUTOR 1 (Tutor académico en caso de realizar el TFG en una empresa o institución)</b>			
NOMBRE Y APELLIDOS	Juan Manuel Cuerva Carvajal		
DEPARTAMENTO	Química Orgánica		
CARGO <sup>(4)</sup>	Catedrático		
TELÉFONO	958243319	E-MAIL	jmcuerva@ugr.es

*Rellenar en caso de haber un segundo tutor*

<b>TUTOR 2</b>			
NOMBRE Y APELLIDOS			
DEPARTAMENTO			
CARGO <sup>(4)</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			
TITULACIÓN			
TELÉFONO		E-MAIL	

<sup>(4)</sup> Catedrático, Profesor Titular, Profesor Contratado Doctor,....

## MEMORIA DE LA PROPUESTA DE TFG

### Introducción.

Las propiedades quirópticas de la materia derivan de interacciones preferenciales de luz circularmente polarizada y materiales quirales enantiopuros. Dicha interacción está gobernada por las leyes de la mecánica cuántica y no son fácilmente asignables de forma sencilla a entidades moleculares concretas. Afortunadamente, los últimos avances en Química Computacional han permitido empezar a comprender las relaciones entre la actividad Quiróptica y la estructura molecular.

### Objetivos.

El objetivo de este trabajo fin de grado es la simulación de entidades moleculares quirales y su respuesta quiróptica para buscar relaciones propiedad-estructura

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

- Simulación de propiedades quirópticas de moléculas orgánicas mediante TD-DFT
- Análisis de los resultados para buscar tendencias en dichas simulaciones.

---

***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](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.

**C.** Trabajos bibliográficos (**C**)