



UNIVERSIDAD
DE GRANADA

PROPUESTA DE TRABAJO FIN DE GRADO

GRADO EN QUÍMICA

CURSO 2019/2020



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	QI-19/20-15		
TIPOLOGÍA	A1	Nº ALUMNOS	1
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
TELÉFONO	958243322	E-MAIL	atorre@ugr.es

DATOS DEL TUTOR

TUTOR 1 (Tutor académico en caso de realizar el TFG en una empresa o institución)			
APELLIDOS, NOMBRE	MOTA ÁVILA, ANTONIO JOSÉ		
DEPARTAMENTO	Química Inorgánica		
CARGO(*)	Profesor Titular de Universidad		
TELÉFONO	958248595	E-MAIL	mota@ugr.es
TUTOR 2 (Rellenar en caso de haber un segundo tutor)			
APELLIDOS, NOMBRE			
DEPARTAMENTO			
CARGO(*)			
TELÉFONO		E-MAIL	
TUTOR DE LA EMPRESA O INSTITUCIÓN (Rellenar en caso de realizar el TFG en una empresa o institución)			
APELLIDOS, NOMBRE			
EMPRESA			
TITULACIÓN			
TELÉFONO		E-MAIL	

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

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

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. <ol style="list-style-type: none">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: topología3. 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	
Fecha prevista comienzo: Octubre	Duración prevista (meses): 6

Fecha: 21/05/2019

FIRMAS

DIRECTOR DEL DEPARTAMENTO	DIRECTOR DE LA INSTITUCIÓN/EMPRESA
 Fdo.: José María Moreno Sánchez	 Fdo.: _____
TUTOR 1/TUTOR ACADÉMICO	TUTOR 2/TUTOR DE LA INSTITUCIÓN/EMPRESA
 Fdo.: Antonio José Mota Ávila	 Fdo.: _____