



UNIVERSIDAD
DE GRANADA

PROPUESTA DE TRABAJO FIN DE GRADO

GRADO EN QUÍMICA

CURSO 2022/2023



Facultad de Ciencias

PROPUESTA DEL DEPARTAMENTO/EMPRESA

DATOS BÁSICOS DEL TFG

TÍTULO TFG	Estudio teórico de las constantes de acoplamiento magnético en complejos metálicos (3d) polinucleares		
CÓDIGO TFG ⁽¹⁾	QI-22-23-08	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.

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, incorporando asimismo otros metales 3d.

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 teóricos basados en un estudio sistemático, así como 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 las propuestas del departamento en formato pdf (Word transformado en pdf, NO escaneado) 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)