



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	Aplicaciones de la Química Computacional en Química Orgánica		
CÓDIGO TFG <sup>(1)</sup>	QO-22-23-12	TIPOLOGÍA <sup>(2)</sup>	A2

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

<sup>(2)</sup> Al final del documento se encuentran las diferentes tipologías

OFERTADO POR	Profesor del Departamento	<input checked="" type="radio"/>
	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>			
LOCALIDAD <sup>(3)</sup>		C.P. <sup>(3)</sup>	

<sup>(3)</sup> 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	JOSE ANTONIO DOBADO JIMENEZ		
DEPARTAMENTO	QUÍMICA ORGÁNICA		
CARGO <sup>(4)</sup>	Catedrático		
TELÉFONO	958-243186	E-MAIL	<a href="mailto:dobado@ugr.es">dobado@ugr.es</a>

Rellenar en caso de haber un segundo tutor

TUTOR 2	
NOMBRE Y APELLIDOS	
DEPARTAMENTO	

CARGO <sup>(4)</sup>			
TELÉFONO		E-MAIL	
TUTOR DE LA EMPRESA O INSTITUCIÓN <i>(Rellenar en caso de realizar el TFG en una empresa o institución)</i>			
NOMBRE Y APELLIDOS			
TITULACIÓN			
TELÉFONO		E-MAIL	

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

## MEMORIA DE LA PROPUESTA DE TFG

### Introducción.

En el presente TFG se abordarán por un lado las metodologías actuales más relevantes de métodos de cálculo y su clasificación (métodos ab initio, semiempíricos, DFT y mecánica molecular) así como los aspectos prácticos de la Química Computacional del manejo de los programas informáticos de modelización molecular.

### Objetivos.

El alumno aprenderá a manejar los diferentes módulos en los que consta todo programa genérico de modelización molecular, utilizando dichas herramientas a la resolución de ejemplos prácticos sencillos dentro del área de la Química Orgánica.

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

- 1) Revisión de los aspectos teóricos más generales sobre química computacional y metodologías de cálculo.
- 2) Revisión bibliográfica y selección de los sistemas modelo a estudiar.
- 3) Análisis de los antecedentes de estudios mecano-cuánticos de sistemas similares, así como de potenciales aplicaciones.
- 4) Aprendizaje y uso de herramientas de Modelización Molecular, comandos básicos de Unix/Linux y uso del cluster de supercomputación y entorno de red Alhambra para ejecución de cálculos moleculares.
- 5) Diseño molecular y análisis conformacional de los sistemas modelo a estudiar.
- 6) Optimización geométrica y validación de los puntos estacionarios obtenidos mediante análisis vibracional a nivel de teoría semiempírico y Hartree-Fock (HF).
- 7) Refinamiento final y estudio energético empleando métodos basados en la Teoría del Funcional de la Densidad (DFT).
- 8) Estudio de las propiedades electrónicas y energéticas de los sistemas modelo.
- 9) Composición de tablas y figuras de forma resumida con información procedente de los cálculos moleculares. Comparación e interpretación de los resultados.
- 10) Elaboración de las conclusiones según los resultados obtenidos, metodología usada y objetivos del trabajo marcados.
- 11) Redacción del TFG y maquetación de los resultados usando herramientas de edición de textos científicos, LaTeX (opcional).

---

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:

1. Estudio de casos, teóricos o prácticos, relacionados con la temática del Grado, a partir de material ya disponible en los Centros.
2. Trabajos experimentales, de toma de datos de campo, de laboratorio, etc.
3. 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:

1. Elaboración de un informe o un proyecto de naturaleza profesional.
2. Elaboración de un plan de empresa.
3. Simulación de encargos profesionales.

C. Trabajos bibliográficos (C)