



1. DATOS BÁSICOS DEL TFG:

Título: Aplicaciones en Química Computacional: reacción Diels-Alder intramolecular

Descripción general (resumen y metodología):

El presente Trabajo de Fin de Grado (TFG) se centrará en el estudio de las aplicaciones de la química computacional en la reacción de Diels-Alder intramolecular. La reacción de Diels-Alder es una cicloadición [4+2] entre un dieno y un dienófilo, y es fundamental en la síntesis orgánica debido a su capacidad para formar anillos de seis miembros con alta regio- y estereoselectividad. En este TFG se emplearán herramientas de química computacional para investigar los mecanismos y la dinámica de la reacción de Diels-Alder intramolecular. La metodología incluirá: Modelado Molecular: Uso de software Avogadro para realizar cálculos de estructura y energía. Teoría del Funcional de la Densidad (DFT): Aplicación de métodos DFT para estudiar las propiedades electrónicas de los reactivos, intermediarios y productos (utilización de software como Gaussian u ORCA). Optimización de Geometrías y Cálculos de Frecuencias: Determinación de estados de transición y productos de reacción.

Tipología: Estudio de casos, teóricos o prácticos, relacionados con la temática del Grado.

Objetivos planteados:

Los objetivos específicos del TFG son los siguientes: Comprender los Fundamentos Teóricos: Revisar la literatura sobre la reacción de Diels-Alder y las técnicas de química computacional aplicables. Desarrollar un Modelo Computacional: Construir modelos moleculares precisos de los reactivos estados de transición y productos de la reacción. Realizar Cálculos Energéticos: Determinar las energías de activación y las barreras de energía asociadas con la reacción. Investigar el Mecanismo de Reacción: Identificar y caracterizar los estados de transición y los intermediarios. Evaluar Factores Influentes: Estudiar cómo diferentes condiciones (por ejemplo, disolvente, temperatura/presión) afectan la reacción. Validar Resultados: Comparar los resultados computacionales con datos experimentales disponibles para validar las predicciones teóricas.

Bibliografía básica:

1) Lewars, E.G.; Computational Chemistry: Introduction to the Theory and Applications of Molecular and Quantum Mechanics; Springer (2011). 2) Cramer, C.J. Essentials of Computational Chemistry: Theories and Models; (2a Ed.) Wiley (2004). 3) Hehre, W.J.; Radon, L.; Schleyer, P.v.R.; Pople, J.A.; Ab initio Molecular Orbital Theory; Wiley (1986). 4) Young, D.C.; Computational chemistry: a practical guide for applying techniques to real world problems; Wiley (2001). 5) Leach, A.R.; Molecular Modelling. Principles and Applications; Longman (1996). Jensen, F.; Introduction to Computational Chemistry; Wiley (1999). 6) Levine, I. N. (2013). Quantum Chemistry (7th ed.). Pearson.

Recomendaciones y orientaciones para el estudiante:

Familiarización con Software: Dedicar tiempo a aprender a utilizar programas de química computacional como Avogadro Gaussian u ORCA. Hay numerosos tutoriales en línea y documentación oficial que pueden ser de gran ayuda. Revisión de Literatura: Realizar una exhaustiva revisión bibliográfica sobre la reacción de Diels-Alder intramolecular y métodos computacionales. Esto te proporcionará una base teórica sólida. Planificación del Proyecto: Definir un cronograma de trabajo detallado (retroplanning). Establecer hitos y plazos para cada etapa del proyecto. Análisis Crítico de Resultados: Desarrollar habilidades para interpretar y analizar datos

computacionales. Aprende a reconocer posibles errores y limitaciones en los cálculos. Comunicación Científica: Practica la redacción científica y la presentación de resultados. La claridad en la comunicación es clave para un TFG exitoso. Consulta con el Tutor: Mantén una comunicación regular con tu tutor académico. Su orientación será fundamental para superar dificultades y mejorar la calidad de tu trabajo. Ética y Responsabilidad: Asegúrate de seguir las normas éticas en la realización de simulaciones y en la redacción de tu TFG. Con una planificación adecuada y dedicación, este TFG puede contribuir significativamente a tu formación como químico y a tu comprensión de la química computacional y la síntesis orgánica.

Plazas: 1

2. DATOS DEL TUTOR/A:

Nombre y apellidos: JOSÉ ANTONIO DOBADO JIMÉNEZ

Ámbito de conocimiento/Departamento: QUÍMICA ORGÁNICA

Correo electrónico: dobado@ugr.es

3. COTUTOR/A DE LA UGR (en su caso):

Nombre y apellidos:

Ámbito de conocimiento/Departamento:

Correo electrónico:

4. COTUTOR/A EXTERNO/A (en su caso):

Nombre y apellidos:

Correo electrónico:

Nombre de la empresa o institución:

Dirección postal:

Puesto del tutor en la empresa o institución:

5. DATOS DEL ESTUDIANTE:

Nombre y apellidos:

Correo electrónico: