



1. DATOS BÁSICOS DEL TFG:

Título: Modelización de las propiedades moleculares

Descripción general (resumen y metodología):

Las propiedades moleculares se encuentran codificadas en la ecuación de Schrödinger y no son accesibles de forma sencilla. La resolución de dicha ecuación supone el uso de superordenadores y/o tiempos largos de computación. Con la llegada de los sistemas de aprendizaje profundo “deep learning” se abre la posibilidad de generar dichas propiedades de forma más eficiente y por tanto entender y optimizar dichas propiedades. Se propone la generación de propiedades moleculares siguiendo metodologías ab initio para ser analizadas mediante procesos de aprendizaje profundo.

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

Objetivos planteados:

Los objetivos serían 1. La generación de datos sobre propiedades moleculares 2. El análisis de dichos datos mediante métodos de aprendizaje profundo.

Bibliografía básica:

Can Deep Learning Search for Exceptional Chiroptical Properties? The Halogenated [6] Helicene Case <https://chemrxiv.org/engage/chemrxiv/article-details/661cf64491aefa6ce19830a9> Can Magnetic Dipole Transition Moment Be Engineered? Angewandte Chemie International Edition, 2024, 63, e202316696

Recomendaciones y orientaciones para el estudiante:

Plazas: 1

2. DATOS DEL TUTOR/A:

Nombre y apellidos: JUAN MANUEL CUERVA CARVAJAL

Ámbito de conocimiento/Departamento: QUÍMICA ORGÁNICA

Correo electrónico: jmcuerva@ugr.es

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

Nombre y apellidos: SANDRA MÍGUEZ LAGO

Ámbito de conocimiento/Departamento: QUÍMICA ORGÁNICA

Correo electrónico: sandramiguezlagolago@ugr.es

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: