



### 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:**