



1. DATOS BÁSICOS DEL TFG:

Título: Estudio de la serie espectroquímica en complejos de metales de transición

Descripción general (resumen y metodología):

El trabajo consistiría en realizar cálculos computacionales sobre diferentes complejos homolépticos de metales de transición. Se analizaría el valor del campo de ligandos en función del desdoblamiento (Δ) generado para diferentes geometrías (octaédrica, tetraédrica ...).

1. El estudiante deberá familiarizarse con el manejo de diferentes programas: protocolo de intercambio de ficheros, química computacional.
2. Envío de trabajos para el cálculo de los diferentes complejos a partir de las correspondientes estructuras optimizadas basadas en un estudio sistemático.
3. Análisis de los resultados obtenidos
4. Generación de un informe final

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

Objetivos planteados:

- Conexiones a equipos remotos
- Conocimiento de LINUX básico
- Manejo de programas de Química Cuántica
- Comprensión y análisis de los resultados
- Estudio de propiedades moleculares

Bibliografía básica:

Manual de ORCA 6.0
Manual de Multiwfn v.3.8

Recomendaciones y orientaciones para el estudiante:

Tener unos conocimientos básicos de LINUX a nivel de administración de ficheros.

Plazas: 1

2. DATOS DEL TUTOR/A:

Nombre y apellidos: ANTONIO JOSÉ MOTA ÁVILA

Ámbito de conocimiento/Departamento: QUÍMICA INORGÁNICA

Correo electrónico: mota@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:

Centro de convenio Externo:

5. DATOS DEL ESTUDIANTE:

Nombre y apellidos:

Correo electrónico: