



UNIVERSIDAD DE EXTREMADURA

FACULTAD DE CIENCIAS

ANEXO 1 PROPUESTA DE TRABAJO FIN DE GRADO

-DEPARTAMENTO DE LA UEX RESPONSABLE DE LA OFERTA: Ingeniería Química y Química Física

-TÍTULO DEL TRABAJO: “Estudio computacional de la influencia del disolvente sobre espectros electrónicos”

- CARACTERÍSTICAS DEL TRABAJO FIN DE GRADO

-Tipo de trabajo (señalar con una cruz el que proceda):

Teórico		Revisión e investigación bibliográfica	X	Numérico	
Proyectos de ingeniería		Proyectos de diseño industrial		Informes	
Computacional	X	Experimental		Otros (especificar)	

-Descripción del trabajo (objetivos, metodología...)

OBJETIVO GENERAL

Se pretende que el alumno profundice en el estudio de la influencia que la polaridad del disolvente tiene sobre los espectros de moléculas de interés químico y biológico. Para ello realizará el estudio mecano-cuántico de los espectros electrónicos de moléculas en presencia de disolventes de distinta polaridad empleando distintas aproximaciones teóricas. Se prestará especial atención a la influencia que las interacciones específicas (especialmente puentes de hidrógeno) tengan sobre los espectros de absorción.

METODOLOGÍA DEL TRABAJO

Revisión de la bibliografía básica sobre la influencia del disolvente sobre espectros electrónicos.
Realización de cálculos empleando software específico orientado al cálculo de espectros electrónicos de moléculas.
Incorporación de los efectos del disolvente mediante distintos métodos.

Observaciones: PARA EL GRADO DE QUÍMICA

-TUTORES:

Nombre: Manuel Ángel Aguilar Espinosa

Área de conocimiento: Química Física

Fecha de aprobación del Consejo del Departamento: 31/10/2012

V° B° y Firma del Director del Dpto



V° B° y Firma del Tutor

A handwritten signature in black ink, appearing to read "M. Aguilar".