



### 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 ( $\Delta$ ) 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:**