



1. DATOS BÁSICOS DEL TFG:

Título: Estudio computacional de propiedades optoelectrónicas de moléculas orgánicas aromáticas mediante métodos de la teoría del funcional de la densidad

Descripción general (resumen y metodología):

Resumen

El estudio de las propiedades optoelectrónicas de moléculas orgánicas aromáticas ha adquirido una gran relevancia debido a sus potenciales aplicaciones en dispositivos electrónicos orgánicos, materiales fotoactivos, sensores químicos y tecnologías energéticas. En este contexto, los métodos computacionales basados en la teoría del funcional de la densidad (DFT) constituyen herramientas fundamentales para investigar la estructura electrónica y predecir propiedades moleculares de interés sin necesidad de recurrir exclusivamente a procedimientos experimentales.

El presente Trabajo Fin de Grado se centrará en el estudio computacional de una selección de moléculas orgánicas aromáticas representativas, analizando la relación entre estructura molecular y propiedades optoelectrónicas mediante metodologías DFT y TD-DFT. El trabajo permitirá obtener una visión general del potencial de estas herramientas para la predicción y racionalización de propiedades relevantes en química molecular y ciencia de materiales.

Metodología

El trabajo tendrá un carácter teórico-computacional. Inicialmente se realizará una revisión bibliográfica sobre fundamentos de DFT, propiedades optoelectrónicas y aplicaciones de sistemas aromáticos orgánicos. Posteriormente, se seleccionará un conjunto representativo de moléculas aromáticas y se llevarán a cabo cálculos computacionales utilizando software de química cuántica. Las etapas metodológicas incluirán:

- Optimización geométrica de las estructuras moleculares.
- Verificación de mínimos energéticos mediante análisis vibracional.
- Cálculo de propiedades electrónicas fundamentales (energías HOMO-LUMO, potencial de ionización, afinidad electrónica, etc.).
- Estudio de propiedades ópticas mediante cálculos de excitación electrónica (TD-DFT).
- Comparación y análisis de tendencias estructura-propiedad.
- Discusión crítica de las limitaciones y alcance de los métodos empleados.

Tipología: Trabajos experimentales, de toma de datos de campo o de laboratorio.

Objetivos planteados:

Objetivo general

Aplicar métodos basados en la teoría del funcional de la densidad para estudiar propiedades optoelectrónicas de moléculas orgánicas aromáticas y analizar la relación entre estructura electrónica y comportamiento molecular.

Objetivos específicos

- Comprender los fundamentos teóricos de los métodos DFT y su aplicación en química computacional.
- Seleccionar y caracterizar computacionalmente moléculas aromáticas representativas.
- Calcular propiedades electrónicas relacionadas con la respuesta optoelectrónica molecular.
- Analizar espectros electrónicos teóricos y transiciones excitadas mediante TD-DFT.

- Comparar resultados computacionales con datos bibliográficos disponibles.
- Evaluar la utilidad y limitaciones de las metodologías empleadas.

Bibliografía básica:

- Jensen, F. (2017). Introduction to Computational Chemistry (3rd ed.). Wiley.
- Cramer, C. J. (2013). Essentials of Computational Chemistry: Theories and Models (2nd ed.). Wiley.
- Koch, W., & Holthausen, M. C. (2015). A Chemist's Guide to Density Functional Theory. Wiley-VCH.
- Parr, R. G., & Yang, W. (1989). Density-Functional Theory of Atoms and Molecules. Oxford University Press.
- Szabo, A., & Ostlund, N. S. (1996). Modern Quantum Chemistry: Introduction to Advanced Electronic Structure Theory. Dover Publications.
- Laurent, A. D., & Jacquemin, D. (2013). TD-DFT benchmarks: A review. International Journal of Quantum Chemistry, 113, 2019-2039.

Recomendaciones y orientaciones para el estudiante:

Este trabajo es de carácter teórico-computacional basado en métodos de química cuántica y análisis bibliográfico de resultados.

Plazas: 1

2. DATOS DEL TUTOR/A:

Nombre y apellidos: SANDRA MÍGUEZ LAGO

Ámbito de conocimiento/Departamento: QUÍMICA ORGÁNICA

Correo electrónico: sandramiguezlag@ugr.es

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

Nombre y apellidos: Boris Pérez Cañedo

Ámbito de conocimiento/Departamento: QUÍMICA ORGÁNICA

Correo electrónico: bpcanedo@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:

Centro de convenio Externo:

5. DATOS DEL ESTUDIANTE:

Nombre y apellidos:

Correo electrónico: