

Anexo II

TITULACIÓN: Grado en Química

MEMORIA INICIAL DEL TRABAJO FIN DE GRADO

CENTRO: Facultad de Ciencias Experimentales

CURSO ACADÉMICO: 2014-15



UNIVERSIDAD DE JAÉN

Facultad de Ciencias Experimentales

Título del Trabajo Fin de Grado:

Estudio teórico de propiedades estructurales y de inyección de carga de azometinos con aplicaciones en electrónica orgánica.

1. DATOS BÁSICOS DE LA ASIGNATURA

NOMBRE: Trabajo Fin de Grado

CÓDIGO: 10316001

CARÁCTER: Obligatorio

Créditos ECTS: 15

CURSO: Cuarto

CUATRIMESTRE: Segundo

2. TUTOR/COTUTOR(en su caso)

Amparo Navarro Rascón / M^a Paz Fernández de Liencres de la Torre

3. VARIANTE Y TIPO DE TRABAJO FIN DE GRADO (Artículo 8 del Reglamento de los Trabajos Fin de Grado)

Específico. Experimental

4. COMPETENCIAS (*) Y RESULTADOS DE APRENDIZAJE

Competencias transversales:

- B1. Capacidad de análisis y síntesis.
- B2. Capacidad de organización y planificación.
- B3. Comunicación oral y escrita en la lengua nativa.
- B4. Conocimiento de una lengua extranjera (preferiblemente inglés).
- B5. Capacidad para la gestión de datos y la generación de información/ conocimiento mediante el uso de las nuevas tecnologías de información y comunicación.
- B6. Resolución de problemas.
- B7. Capacidad de adaptarse a nuevas situaciones y toma de decisiones.
- B8. Trabajo en equipo.
- B9. Razonamiento crítico.
- B10. Capacidad de aprendizaje autónomo para el desarrollo continuo profesional.
- B11. Sensibilidad hacia temas medioambientales.
- B12. Compromiso ético.
- B13. Iniciativa y espíritu emprendedor.

Competencias Generales:

- P1. Habilidad para manipular con seguridad materiales químicos, teniendo en cuenta sus propiedades físicas y químicas, incluyendo cualquier peligro específico asociado con su uso.
- P2. Habilidad para llevar a cabo procedimientos estándares de laboratorio implicados en trabajos analíticos y sintéticos, en relación con sistemas orgánicos e inorgánicos.
- P3. Habilidad para la observación, seguimiento y medida de propiedades, eventos o cambios químicos, y el registro sistemático y fiable de la documentación correspondiente.
- P4. Habilidad para manejar instrumentación química estándar, como la que se utiliza para investigaciones estructurales y separaciones.
- P5. Interpretación de datos procedentes de observaciones y medidas en el laboratorio en términos de su significación y de las teorías que la sustentan.
- P6. Capacidad para realizar valoraciones de riesgos relativos al uso de sustancias químicas y procedimientos de laboratorio.
- Q1. Capacidad para demostrar el conocimiento y comprensión de los hechos esenciales, conceptos, principios y teorías relacionadas con la Química.
- Q2. Capacidad de aplicar dichos conocimientos a la resolución de problemas cualitativos y cuantitativos según modelos previamente desarrollados.
- Q3. Competencia para evaluar, interpretar y sintetizar datos e información Química.
- Q4. Capacidad para reconocer y llevar a cabo buenas prácticas en el trabajo científico.
- Q5. Competencia para presentar, tanto en forma escrita como oral, material y argumentación científica a una audiencia especializada.
- Q6. Destreza en el manejo y procesado informático de datos e información química.

Competencias Específicas:

- C6. Aplicar los principios de la mecánica cuántica en la descripción de la estructura y propiedades de átomos y moléculas.
- C10. Comprender los aspectos estructurales de los elementos químicos y sus compuestos, incluyendo estereoquímica.
- C14. Relacionar las propiedades macroscópicas con las propiedades de átomos y moléculas individuales, incluyendo macromoléculas (naturales y sintéticas), polímeros, coloides y otros materiales.

Resultados de aprendizaje	
Resultado 311003D	Capacidad de integrar creativamente sus conocimientos para resolver un problema químico real.
Resultado 311003E	Capacidad para estructurar una defensa sólida de los puntos de vista personales apoyándose en conocimientos científicos bien fundados.
Resultado 311003F	Destreza en la elaboración de informes científicos complejos, bien estructurados y bien redactados.
Resultado 311003G	Destreza en la presentación oral de un trabajo, utilizando los medios audiovisuales más habituales.

5. ANTECEDENTES

En los últimos años se está produciendo un espectacular avance en el desarrollo de dispositivos optoelectrónicos construidos con materiales orgánicos π -conjugados, que representan una alternativa muy atractiva para los dispositivos convencionales inorgánicos, y que cuentan con otras muchas aplicaciones debido a propiedades tales como una gran flexibilidad mecánica, su bajo peso y bajo coste de producción.

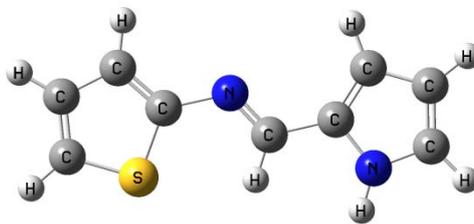
Actualmente los sistemas π -conjugados tienen un amplio campo de aplicación en los dispositivos electrónicos orgánicos de nueva generación tales como diodos orgánicos emisores de luz (OLEDs), células fotovoltaicas (OPVs) y transistores de efecto campo (OFETs), renovables, baratos y procesables en disolución. Estas aplicaciones están relacionadas con la facilidad con la que un electrón (o un hueco) es inyectado desde la interfase metálica del electrodo a una capa orgánica de polímero y con la capacidad de transporte de la carga en la capa orgánica.

Una de las herramientas de la que disponen los químicos para producir dispositivos electrónicos basados en polímeros orgánicos con óptimos rendimientos es la química computacional, basada en cálculos mecanocuánticos que permiten predecir las propiedades ópticas y electrónicas de los componentes de materiales semiconductores, estableciendo además relación con las características estructurales que presentan a escala molecular. Los resultados de esta investigación tienen como fin último el diseño racional de nuevos materiales semiconductores con propiedades mejoradas.

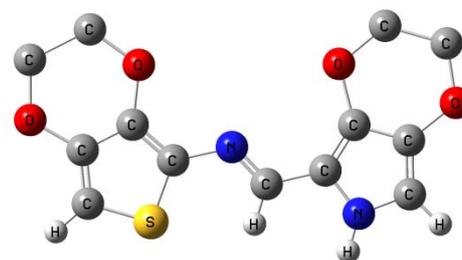
En general, desde un punto de vista teórico, la capacidad semiconductor intrínseca de un material para el transporte de carga viene determinada por cinco factores: la energía de los orbitales moleculares HOMO y LUMO, el potencial de ionización, la afinidad electrónica, la energía de reorganización y la integral de transferencia de carga. Mientras que los tres primeros factores dependen exclusivamente de las propiedades intrínsecas de las moléculas, los dos últimos están determinados además por las interacciones entre moléculas vecinas y, por tanto, relacionados con la estructura en fase sólida del material. Una vez conocidos estos factores para un determinado semiconductor, estos se pueden modificar mediante la inclusión de sustituyentes y/o heteroátomos en la estructura molecular original con el fin de lograr propiedades de transporte de carga más adecuadas para su aplicación.

6. HIPÓTESIS DE TRABAJO

Con este trabajo se pretende introducir al estudiante en el estudio teórico de la estructura molecular y propiedades opto-electrónicas de un tipo de compuestos poliméricos cuya estructura contiene anillos de tiofeno y de pirrol unidos mediante la agrupación azometino, con gran deslocalización π -electrónica, lo que permitirá incrementar la movilidad de carga.



Mediante el uso de programas como Gaussian y GaussView, el estudiante será capaz de diseñar las estructuras monomérica y oligomérica de los compuestos objeto del estudio, optimizar su geometría molecular, analizar las barreras rotacionales y determinar propiedades tales como energías HOMO/LUMO, potencial de ionización y afinidad electrónica, y energía de reorganización.



El análisis de los resultados de este trabajo permitirá al estudiante obtener conclusiones acerca de la interrelación entre las estructuras molecular y electrónica, y las principales propiedades electrónicas que hacen que estos compuestos puedan ser precursores de polímeros semiconductores de interés para su aplicación en el campo de la electrónica orgánica.

7. BREVE DESCRIPCIÓN DE LAS ACTIVIDADES A REALIZAR

1. Revisión bibliográfica para conocer el estado actual de los sistemas orgánicos pi-conjugados con aplicaciones en el campo de la electrónica.
2. Inicio en el manejo del programa GaussView para el diseño de estructuras moleculares.
3. Inicio en el manejo del programa Gaussian para el cálculo de propiedades electrónicas.
4. Optimización de la estructura molecular mediante cálculos mecanocuánticos. Estudio de barreras rotacionales y planaridad de las estructuras moleculares.
5. Cálculo de orbitales HOMO/LUMO, afinidad electrónica, potencial de ionización y energía de reorganización.
6. Análisis de resultados y obtención de conclusiones.
7. Redacción de la memoria del TFG y de una presentación para su exposición pública.

8. DOCUMENTACIÓN/BIBLIOGRAFÍA

- M.J. Frisch et al. Gaussian 09, Revision A.02, Gaussian, Inc.: Wallingford, CT, 2009.



UNIVERSIDAD DE JAÉN

- R. Dennington et al. J. Millan, GaussView, version 5, Semichem. Inc., Shawnee Mission KS, 2009.
- A. Ravve, *Principles of Polymer Chemistry*, 3rd Ed., Springer, New York, 2012.
- T. Blythe, D. Bloor, *Electrical properties of polymer*, 2nd Ed., Cambridge UK, 2005.
- J. Bertrán, V. Branchadell, M. Moreno, M. Sodupe, *Química Cuántica*, Síntesis, 2000.

9. CRONOGRAMA PROVISIONAL

Semana	A3. Tutorías colectivas/individuales (presencial)	A5. Trabajo Fin de Grado / Trabajo autónomo del estudiante	Observaciones
Nº 1 28 enero–1 feb 2015	1	26	Actividad 1
Nº 2 2 – 8 feb 2015		25	
Nº 3 9 – 15 feb 2015	0.5	23	Actividades 1 y 2
Nº 4 16 – 22 feb 2015		23	
Nº 5 23 feb – 1 marzo 2015	0.5	23	Actividad 2
Nº 6 2 – 8 mar 2015		23	
Nº 7 9 – 15 mar 2015	0.5	23	Actividades 3 y 4
Nº 8 16 – 22 mar 2015		23	
Nº 9 23 – 29 mar 2015	0.5	23	Actividad 5
Nº 10 31 mar – 6 abril 2015		23	
Nº 11 6 – 12 abr 2015	0.5	23	Actividades 5 y 6
Nº 12 20- 26 abr 2015		23	
Nº 13 27 abr – 3 may 2015	0.5	23	Actividad 6
Nº 14 4 – 10 may 2015		23	
Nº 15 11 – 17 may 2015	0.5	23	Actividad 7
Nº 16 18 – 19 may 2015	0.5	22	Actividad 7
Total Horas	5	370	



UNIVERSIDAD DE JAÉN

10. IMPLICACIONES ÉTICAS

El TFG requiere autorización de la Comisión de Ética: Sí No

En caso afirmativo, es preceptivo adjuntar la autorización del Comité de Bioética de la Universidad de Jaén o, en su defecto, la solicitud realizada a dicha Comisión.

Nota informativa: Para completar este Anexo II se recomienda consultar la guía docente de la asignatura del Trabajo Fin de Grado que está disponible en el siguiente enlace:

https://uvirtual.ujaen.es/pub/es/informacionacademica/catalogoquiadocentes/p/2014-15/2/103A/10316001/es/2014-15-10316001_es.html

Más información: <http://www10.ujaen.es/conocenos/centros/facexp/trabajofingrado>