UNIVERSIDAD DE JAÉN

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:

Introducción a la **modelización molecular**. Estudio del efecto de grupos electrón-aceptores en las **propiedades optoelectrónicas** de compuestos con potencial para actuar como **conductores y/o semiconductores orgánicos**. Compuestos discóticos.

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)

Tomás Peña Ruiz
Dpto. de Química Física y Analítica
Área de Química Física
Despacho: B3-112
e-mail: truiz@ujaen.es
tfno: 953212555

Manuel Fernández Gómez
Dpto. de Química Física y Analítica
Área de Química Física
Despacho: B3-104
e-mail: mfg@ujaen.es
tfno: 953212148

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 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.
C20. Comprender las propiedades y aplicaciones de los 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

La modelización molecular es una disciplina científica que se ha convertido en una herramienta fundamental en el ámbito de la investigación, ya que consiste en el desarrollo de modelos de sistemas químicos, capaces de predecir e interpretar propiedades de los mismos con interés aplicado. Todo ello sin necesidad de que existan inicialmente dichos sistemas químicos y/o permitiendo la estimación de magnitudes de difícil acceso a nivel experimental.

La modelización molecular se fundamenta en el uso de los principios de la Química Computacional, la cual es a su vez, la extensión práctica de la Química Teórica, incluyendo la Química Cuántica. Se trata de una rama de la Química que pone en valor los conceptos de la Química Teórica dándole una utilidad práctica a los mismos. La Química Computacional, entre otras funciones, traduce los métodos de la Química Teórica a algoritmos informáticos que permiten su uso aplicado.

En lo que a los sistemas se refiere, los materiales orgánicos con propiedades conductoras en general, y los compuestos discóticos en particular, son la base de la electrónica molecular y constituyen una alternativa a los semiconductores inorgánicos por su facilidad de procesado, bajo costo y flexibilidad, entre otras propiedades. De éstas, las más notables surgen de la deslocalización electrónica en el esqueleto carbonado y van desde la conductividad eléctrica a propiedades ópticas sensibles a estímulos externos, lo que ha permitido y potenciado su uso en instrumentos ópticos y eléctricos, OLEDs, OFETs, células fotovoltaicas, etc.

6. HIPÓTESIS DE TRABAJO

El presente trabajo pretende que el estudiante aprenda a utilizar programas típicos de modelización molecular como Gaussian09 y su interfaz gráfica Gaussview 5.0 para modelizar compuestos orgánicos de tipo discótico con la finalidad de encontrar series de los mismos con potencial para ser utilizados como conductores o semiconductores orgánicos. En definitiva, se trata de una iniciación al diseño molecular.

Las propiedades optoelectrónicas de los compuestos vienen condicionadas, en mayor o menor medida, y en su aproximación más simple, por la energía del Orbital Molecular Ocupado de Mayor energía (Highest Occupied Molecular Orbital, HOMO) y la correspondiente al Orbital Molecular Desocupado de Menor energía (Lowest Unoccupied Molecular Orbital, LUMO). En este sentido, una de las estrategias de diseño molecular que puede seguirse consiste en buscar moléculas donde el HOMO y el LUMO se encuentren localizados en diferentes regiones de la estructura molecular, al objeto de poder modificar de forma (casi)independiente dichas regiones y poder sintonizar a voluntad la posición del HOMO y el LUMO. Para ello, se pretende utilizar como táctica construir moléculas que combinen un subsistema donador débil de electrones, que condicionará la energía del HOMO, con otro que sea aceptor fuerte de electrones, el cual determinará la posición del LUMO (W. You, Macromolecules 2012, 45, 607−632).

En este caso, los subsistemas dadores de electrones van a ser compuestos discóticos que incorporan en sus estructuras distintos heteroátomos, y los aceptores van a ser compuestos de tipo 2H-indeno, los cuales incorporan un anillo de 5 miembros y otro de 6 fusionados, como benzotiadiazol y 2H-indenona.

Para la optimización de los distintos modelos moleculares, así como para el cálculo de las propiedades que interesen, se utilizarán distintas aproximaciones basadas en métodos de la teoría de la función de ondas (WFT) y del funcional de densidad (DFT).

UNIVERSIDAD DE JAÉN

7. BREVE DESCRIPCIÓN DE LAS ACTIVIDADES A REALIZAR

- Adquisición de **conocimientos básicos** sobre métodos de búsqueda de bibliografía.
- Adquisición de **conocimientos básicos** sobre modelización molecular y Química Computacional. .
- **Planteamiento del trabajo.**
  + *Perfilar objetivos.*
  + *Búsqueda bibliográfica.*
  + Selección de sistemas: discóticos y grupos aceptores de electrones
  + *Selección de métodos teórico-computacionales:* métodos basados en la función de onda (WFT): y métodos basados en la teoría del funcional de la densidad electrónica (DFT); conjuntos de funciones de base.
  + *Planificación.*
- **Desarrollo del trabajo.**
  + Aprendizaje del uso del programa Gaussian09 y su interfase gráfica Gaussview 5.0.
  + Diseño básico de los sistemas mediante el uso del interfaz gráfico.
  + Optimización de modelos y cálculo de propiedades. Uso de distintas aproximaciones teóricas.
- **Análisis de resultados y conclusiones.** Comparación con datos experimentales cuando sea posible..
- **Escritura, corrección y presentación del trabajo.**

8. DOCUMENTACIÓN/BIBLIOGRAFÍA

- Molecular Modeling for Beginners, 1st ed. Alan Hinchchliffe. John Wiley and Sons Ltd (England). 2003.
- Computational Chemistry. 2nd ed. Errol G. Lewars. Springer (2011)
- Exploring Chemistry with Electronic Structure methods.2ª ed. James B. Foresman, Aeleen Frisch. Gaussian, Inc (Pittsburgh, USA).
- Electrical properties of polymers, 2nd. Ed. Tony Blythe y David Bloor, Cambridge UK 2005
- Conjugated Polymers, Terje A. Skotheim y John R. Reynolds, Eds. CRC Press Boca Raton 2007

9. CRONOGRAMA PROVISIONAL

Semana	A5- Trabajo fin de Grado	Trabajo autónomo	Observaciones
Nº 1, Ene 26 - Feb 1, 2014	**2h**	**24h**	Adquisición de conocimientos básicos relacionados con la búsqueda de bibliografía y la modelización molecular.
Nº 2, Feb 2 – 8, 2014		**24h**	Adquisición de conocimientos básicos relacionados con la Química Computacional.
Nº 3, Feb 9 - 15, 2014	**0,5h**	**24h**	Se perfilan objetivos y planifica el trabajo. Se realiza la búsqueda de bibliografía.
Nº 4, Feb 16 - 22, 2014		**24h**	Revisión de bibliografía. Selección de métodos y sistemas.
Nº 5, Feb 23 - Mar 1, 2014	**1h**	**25h**	Aprendizaje Gaussian09 y Gaussview 5.0. Inicio de cálculos computacionales.
Nº 6, Mar 2 - 8, 2014		**25h**	Cálculos computacionales
Nº 7, Mar 9 - 15, 2014		**25h**	

Nº 8, Mar 16 - 22, 2014	**0,5h**	**24h**	
Nº 9, Mar 23 - 29, 2014		**24h**	Análisis de resultados y conclusiones
Nº10 Periodo no docente: Mar 30 - Abr 5, 2014			
Nº 11, Abr 6 - 12, 2014	**0,5h**	**25h**	Análisis de resultados y conclusiones
Nº 12, Apr 13 - 19, 2014	**0,5h**	**25h**	
Nº 12, Abr 20 – 26, 2014		**25h**	Escritura de la memoria, corrección, realización de la presentación ensayo
Nº 13, Abr 27 - May 3, 2014		**25h**	
Nº. 14, 4 - 10 May 2014		**25h**	
Nº. 15, 11 - 17 May 2014	**1h**	**25h**	
Horas totales:	**6h**	**369h**	375h

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/catalogoguiasdocentes/p/2012-13/2/103A/10316001/es/2012-13-10316001_es.html
Más información: http://www10.ujaen.es/conocenos/centros/facexp/trabajofingrado