



Anexo II		
TITULACIÓN: Grado en Química		
MEMORIA INICIAL DEL TRABAJO FIN DE GRADO		
CENTRO: Facultad de Ciencias Experimentales		
CURSO ACADÉMICO: 2015-16		
Título del Trabajo Fin de Grado:		
Modelización molecular y propiedades opto-electrónicas de sistemas discóticos derivados del 1,3,4-oxadiazol y tiodiazol.		
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:

- 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.

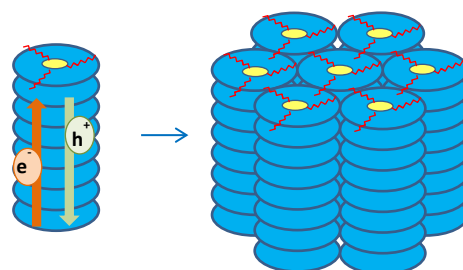
Resultados de aprendizaje

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

Hoy día es muy frecuente utilizar moléculas orgánicas conjugadas con propiedades de semiconductores como componentes activos de dispositivos electrónicos tales como diodos emisores de luz (OLED), células fotovoltaicas (OPV), transistores de efecto campo (OFET), unidades de memoria y sensores. Una alternativa a los compuestos conjugados clásicos formados por oligómeros y polímeros lineales, son los materiales constituidos por moléculas autoensambladas capaces de formar estructuras estables mediante interacciones supramoleculares similares a las que se producen a escala biológica. Este es el caso de los cristales líquidos (LCs), también llamados mesógenos, que combinan la fluidez de los líquidos y el orden de los cristales, presentando además interesantes propiedades estructurales y electrónicas.

Los cristales líquidos discóticos (DLCs) constituyen un tipo de mesógenos formados por moléculas a modo de disco, constituidas por un núcleo central aromático (denominado core) y cadenas periféricas flexibles, que favorecen el apilamiento en una dirección formando estructuras columnares altamente ordenadas. Su estructura les permite formar canales unidimensionales para el transporte de carga ya que se origina un fuerte solapamiento de los orbitales π entre discos adyacentes (interacciones π -stacking) que se traduce en un transporte de los electrones (o huecos) desde un disco al siguiente.



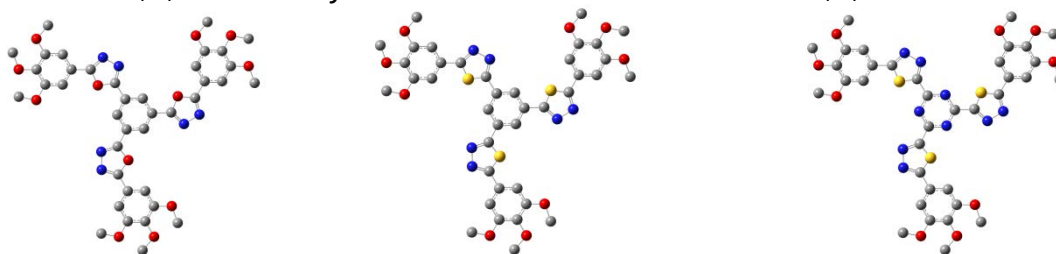
La propiedad más importante de un sistema discótico es su habilidad para conducir la carga a través de los cores aromáticos apilados, por tanto deben presentar altos valores de movilidades de carga. Además, es imprescindible conocer otras propiedades relacionadas con el transporte de carga como son las energías HOMO-LUMO, el potencial de ionización y la afinidad electrónica, la energía de reorganización y la integral de transferencia de carga. Los valores de esta última propiedad dependerán en gran medida de la disposición de los cores (distancia y ángulo rotacional entre cores, desplazamientos laterales, entre otros) a fin de que esté favorecida la deslocalización π -electrónica y la movilidad de carga.

Una de las herramientas de la que disponen los químicos para predecir el valor de las propiedades electrónicas y estructurales antes mencionadas, y por tanto avanzar en el desarrollo de nuevos materiales, es la modelización molecular basada en métodos de la química cuántica, también denominada química computacional. En el campo concreto de los semiconductores orgánicos, la modelización molecular puede conducir al diseño racional de nuevos materiales con propiedades mejoradas respecto a los que se conocen actualmente, siendo éste nuestro último objetivo.

6. HIPÓTESIS DE TRABAJO

Con este trabajo se pretende introducir al estudiante en el campo de la modelización

molecular como herramienta básica para el estudio teórico de la estructura molecular y propiedades opto-electrónicas de una serie de compuestos discóticos derivados del 1,3,4-oxadiazol o 1,3,4-tiodiazol y con anillo central de benceno o 1,3,5-triazina.



Mediante el uso de programas como Gaussian y GaussView, el estudiante será capaz de diseñar las estructuras tanto del monómero como del dímero de los compuestos objeto del estudio, optimizar su geometría molecular, analizar las barreras rotacionales de los grupos laterales, predecir distancias π -stacking y ángulo rotacional entre discos, así como determinar propiedades electrónicas 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 sistemas discóticos 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 π -conjugados y sistemas discóticos con aplicaciones en el campo de la electrónica.
2. Inicio en el manejo del programa GaussView, para el diseño de estructuras moleculares y del programa Gaussian para la realización de los cálculos de optimización de geometrías, frecuencias vibracionales, etc., y para determinar las propiedades electrónicas de los compuestos objeto de estudio.
3. Optimización de la estructura molecular del monómero mediante cálculos mecanocuánticos. Estudio de barreras rotacionales y planaridad de las estructuras moleculares.
4. Estudio de la distancia y ángulo de rotación entre discos a lo largo del eje de apilamiento.
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 D.01, Gaussian, Inc.: Wallingford, CT, 2009.
- 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 25 – 31 enero 2016	1	26	Actividad 1
Nº 2 1 – 7 feb 2016		25	
Nº 3 8 – 14 feb 2016	0.5	23	Actividades 1 y 2
Nº 4 15 – 21 feb 2016		23	
Nº 5 22 – 28 feb 2016	0.5	23	Actividad 2
Nº 6 29 feb – 6 mar 2016		23	
Nº 7 7 – 13 mar 2016	0.5	23	Actividades 3 y 4
Nº 8 14 – 18 mar 2016		23	
Nº 9 28 mar – 3 abril 2016	0.5	23	Actividad 5
Nº 10 4 – 10 abril 2016		23	
Nº 11 11 – 17 abr 2016	0.5	23	Actividades 5 y 6
Nº 12 18- 24 abr 2016		23	
Nº 13 25 abr – 1 may 2016	0.5	23	Actividad 6
Nº 14 2 – 8 may 2016		23	
Nº 15 9 – 13 may 2016	0.5	23	Actividad 7
Total Horas	5	370	



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/catalogoguiasdocentes/p/2014-15/2/103A/10316001/es/2014-15-10316001_es.html

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