

Anexo II

TITULACIÓN: Grado en Química

MEMORIA INICIAL DEL TRABAJO FIN DE GRADO

CENTRO: Facultad de Ciencias Experimentales

CURSO ACADÉMICO: 2015-16



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 **semiconductores orgánicos**. Derivados de tipo radialeno con azufre

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

tfn: 953213648

M^a Paz Fernández de Liencres

Dpto. de Química Física y Analítica

Área de Química Física

Despacho: B3-133

e-mail: liencres@ujaen.es

tfn: 953212755

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

código	Denominación de la competencia
B1	Capacidad de análisis y síntesis
B10	Capacidad de aprendizaje autónomo para el desarrollo continuo profesional
B11	Sensibilidad hacia temas medioambientales
B12	Compromiso ético
B13	Iniciativa y espíritu emprendedor
B2	Capacidad de organización y planificación
B3	Comunicación oral y escrita en la lengua nativa
B4	Conocimiento de una lengua extranjera (preferentemente 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
Q1	Capacidad para demostrar el conocimiento y comprensión de los hechos esenciales, conceptos, principios y teorías relacionadas con la Química.
Q2	Capacidad para 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.

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, 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 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 tipo radialeno que incorporan en sus estructuras azufre 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).

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: molécula base 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 Hinchcliff. John Wiley and Sons Ltd (England). 2003.
- Computational Chemistry. 2nd ed. Errol G. Lewars. Springer (2011)
- Exploring Chemistry with Electronic Structure methods. 2^a 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 25 - 31, 2016	2h	24h	Adquisición de conocimientos básicos relacionados con la búsqueda de bibliografía y la modelización molecular.
Nº 2, Feb 1 – 7, 2016		24h	Adquisición de conocimientos básicos relacionados con la Química Computacional.
Nº 3, Feb 8 - 14, 2016	0,5h	24h	Se perfilan objetivos y planifica el trabajo. Se realiza la búsqueda de bibliografía.
Nº 4, Feb 15 - 21, 2016		24h	Revisión de bibliografía. Selección de métodos y sistemas.
Nº 5, Feb 22 - 28, 2016	1h	25h	Aprendizaje Gaussian09 y Gaussview 5.0. Inicio de cálculos computacionales.
Nº 6, Feb 29 - Mar 6, 2016		25h	Cálculos computacionales
Nº 7, Mar 7 - 13, 2016		25h	
Nº 8, Mar 14 - 20, 2016	0,5h	24h	
Nº 9, Periodo no docente Mar 21 - 27, 2016			
Nº10, Mar 28 - Abr 3, 2016		24h	Análisis de resultados y conclusiones
Nº 11, Abr 4 - 10, 2016	0,5h	25h	
Nº 12, Apr 11 - 17, 2016	0,5h	25h	
Nº 13, Abr 18 – 24, 2016		25h	Escritura de la memoria, corrección, realización de la presentación ensayo
Nº 14, Abr 25 - May 1, 2016		25h	
Nº 15, 2 - 8 May 2016		25h	
Nº 16, 9 - 15 May 2016	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/catalogoquiadocentes/p/2012-13/2/103A/10316001/es/2012-13-10316001_es.html

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