

**TFG-A 2021/2022**  
**Grao en Química**Liña de traballo fin de grao  
proposta por docente(s)**1 TITOR/A**

APELIDOS E NOME

**Nieto Faza, Olalla**

CORREO-E

faza@uvigo.es

DEPARTAMENTO

C12 Química orgánica

**2 COTITOR/A**

APELIDOS E NOME

**Sofia Kiriakidi**

CORREO-E

sofia.kiriakidi@uvigo.es

DEPARTAMENTO / ORGANISMO

C12 Química orgánica

**3 PROPOSTA TFG**

TÍTULO

*Estudo computacional de procesos catalíticos para valorización da biomasa*

BREVE DESCRICIÓN DO CONTIDO, METODOLOXÍA E PLAN DE TRABALLO

Neste traballo empregaranse as ferramentas da Química Computacional para analizar o mecanismo de reaccións de transferencia de osíxeno e rotura oxidativa catalizadas por metais de transición en elevado estado de oxidación (V(V), Mo(VI), Re(VII)). O obxectivo é contribuír ó desenvolvemento de novos sistemas catalíticos que permitan obter, a partir de biomasa, compostos de utilidade para a industria química, substituíndo así o petróleo por materias primas renovables, valorizando ó mesmo tempo os refugallos da actividade agroforestal.

Estes estudos mecanísticos, avaliando os camiños de reacción dispoñibles e o efecto sobre eles do disolvente, do substrato, do axente redutor e dos ligandos sobre o centro metálico, fornecerán información sobre como acadar transformacións máis eficientes, con rendementos máis altos e temperaturas máis

LUGAR DE REALIZACIÓN

Facultade de Química, Seminario 11

**Nota:** As persoa(s) que presenta(n) este formulario comprométense a dispoñer dos medios materiais necesarios para realizar o traballo proposto.

(Asinar dixitalmente)

Firmado por KYRIAKIDI  
SOFIA - \*\*\*\*1870\* el  
día 08/10/2021 con un  
certificado emitido  
por AC FNMT Usuarios

**TFG-A 2021/2022**  
**Grao en Química**Liña de traballo fin de grao  
proposta por docente(s)**1 TITOR/A**

APELIDOS E NOME

**Nieto Faza, Olalla**

CORREO-E

faza@uvigo.es

DEPARTAMENTO

C12 Química orgánica

**2 COTITOR/A**

APELIDOS E NOME

**Sofia Kiriakidi**

CORREO-E

sofia.kiriakidi@uvigo.es

DEPARTAMENTO / ORGANISMO

C12 Química orgánica

**3 PROPOSTA TFG**

TÍTULO

*Selectividade das reaccións de substitución alílica a través de modelización molecular.*

BREVE DESCRICIÓN DO CONTIDO, METODOLOXÍA E PLAN DE TRABALLO

As reaccións de substitución alílica son procesos moi versátiles en síntese, xa que dan lugar á formación dunha ampla serie de enlaces C-C, C-heteroátomo, ó tempo que permiten controlar a rexio e estereoselectividade do proceso. Este tipo de reaccións engloba tanto as máis sinxelas de substitución nucleófila bimolecular con reorganización alílica (SN2') coma outras reaccións de substitución catalizadas por metais, con mecanismos non concertados nos que interveñen etapas de transmetalación, eliminación redutora, etc. Con este traballo pretendemos elaborar un modelo de aplicación ampla para poder predicir e controlar a selectividade destas reaccións. Revisaranse con ferramentas computacionais modernas os modelos de Paquette, Houk e Stohrer (1,2) para explicar a selectividade sin/anti nos sistemas SN2' máis simples: cadeas abertas, sen metais, para explorar a continuación a selectividade de reaccións intramoleculares en sistemas cíclicos máis ou menos tensionados.

LUGAR DE REALIZACIÓN

Facultade de Química, Seminario 11

**Nota:** As persoa(s) que presenta(n) este formulario comprométense a dispoñer dos medios materiais necesarios para realizar o traballo proposto.

(Asinar dixitalmente)

Firmado por  
KYRIAKIDI SOFIA -  
\*\*\*\*1870\* el día  
08/10/2021 con un

**TFG-A 2021/2022**  
**Grao en Química**Liña de traballo fin de grao  
proposta por docente(s)**1 TITOR/A**

APELIDOS E NOME

**Nieto Faza, Olalla**

CORREO-E

faza@uvigo.es

DEPARTAMENTO

C12 Química orgánica

**2 COTITOR/A**

APELIDOS E NOME

**Sofia Kiriakidi**

CORREO-E

sofia.kiriakidi@uvigo.es

DEPARTAMENTO / ORGANISMO

C12 Química orgánica

**3 PROPOSTA TFG**

TÍTULO

*Límites de aplicación das regras de Woodward-Hoffmann en ciclacións de sistemas polarizados.*

BREVE DESCRICIÓN DO CONTIDO, METODOLOXÍA E PLAN DE TRABALLO

Este TFG pretende contribuir a definir a fronteira entre procesos pericíclicos e mecanismos iónicos nas reaccións de ciclación intramolecular de sistemas conxugados polarizados. Estudárasen computacionalmente (empregando técnicas baseadas na Teoría do Funcional da Densidade e métodos post-HF se é necesario) reaccións que na bibliografía aparecen definidas como pericíclicas pero sobre as que se pode superpoñer un mecanismo electrófilo-nucleófilo. Analísase a selectividade nestes procesos e o seu encaixe, ou non, nas regras de Woodward-Hoffmann dende varias fronteiras: criterios enerxéticos, xeométricos, orbitálicos, de aromaticidade, localización e deslocalización electrónicas, etc. Para iso empregárase unha ampla variedade de técnicas de análise da estrutura electrónica. Trabállase cos sistemas de computación de altas prestacións (HPC) do Centro de Supercomputación de Galicia (CESGA) e as infraestruturas computacionais do grupo.

LUGAR DE REALIZACIÓN

Facultade de Química, Seminario 11

**Nota:** As persoa(s) que presenta(n) este formulario comprométese a dispoñer dos medios materiais necesarios para realizar o traballo proposto.

(Asinar dixitalmente)

Firmado por KYRIAKIDI  
SOFIA - \*\*\*\*1870\* el  
día 08/10/2021 con un  
certificado emitido  
por AC FNMT Usuarios

COMISIÓN TFG QUÍMICA ( [decanatoquimica@uvigo.es](mailto:decanatoquimica@uvigo.es) )

**TFG-A 2021/2022**  
**Grao en Química**Liña de traballo fin de grao  
proposta por docente(s)**1 TITOR/A**

APELIDOS E NOME

**Nieto Faza, Olalla**

CORREO-E

faza@uvigo.es

DEPARTAMENTO

C12 Química orgánica

**2 COTITOR/A**

APELIDOS E NOME

**Sofia Kiriakidi**

CORREO-E

sofia.kyriakidi@uvigo.es

DEPARTAMENTO / ORGANISMO

C12 Química orgánica

**3 PROPOSTA TFG**

TÍTULO

*Exploración computacional das propiedades magnéticas de imáns moleculares*

BREVE DESCRICIÓN DO CONTIDO, METODOLOXÍA E PLAN DE TRABALLO

Os imáns moleculares son estruturas moleculares paramagnéticas cunha relaxación magnética lenta, que lles outorga propiedades similares ás dos imáns convencionais, nos que existe orde a longa distancia. Teñen aplicacións potenciais como nanoimáns en unidades de almacenaxe de información e computación, nanomedicina, etc. O obxectivo deste TFG consiste en estudar as propiedades magnéticas de imáns moleculares baseados en estruturas lineais de compostos de coordinación alternando dous metais de transición diferentes. Utilizarase DFT para optimizar as estruturas dos sistemas, avaliar as propiedades dos distintos estados de spin e calcular os acopramentos magnéticos. En casos particulares, usaranse Hamiltonianos relativistas e/ou métodos post-HF para acadar una descrición adecuada dos distintos estados de spin e o acopramento magnético. Estudaremos a influencia nas propiedades magnéticas do estado de oxidación dos metais, da xeometría dos

LUGAR DE REALIZACIÓN

Facultade de Química, Seminario 11

**Nota:** As persoa(s) que presenta(n) este formulario comprométense a dispoñer dos medios materiais necesarios para realizar o traballo proposto.

(Asinar dixitalmente)

Firmado por KYRIAKIDI  
SOFIA - \*\*\*\*1870\* el  
día 08/10/2021 con un  
certificado emitido  
por AC FNMT Usuarios

COMISIÓN TFG QUÍMICA ( [decanatoquimica@uvigo.es](mailto:decanatoquimica@uvigo.es) )

# TFG-A 2021/2022

## Grao en Química

Liña de traballo fin de grao  
proposta por docente(s)

### 1 TITOR/A

APELIDOS E NOME **Cid Fernández, Magdalena**

CORREO-E **mcid@uvigo.es**

DEPARTAMENTO C12 Química orgánica

### 2 COTITOR/A

APELIDOS E NOME **Álvarez García, Jonathan**

CORREO-E **jonyyag@hotmail.com**

DEPARTAMENTO / ORGANISMO C12 Química orgánica

### 3 PROPOSTA TFG

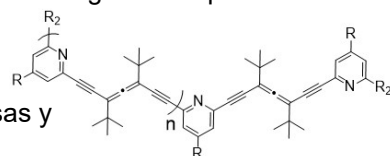
#### TÍTULO

*Síntesis de oligómeros piridilalénicos quirales para la detección de azúcares.*

#### BREVE DESCRIPCIÓN DO CONTIDO, METODOLOXÍA E PLAN DE TRABALLO

Diferentes biopolímeros naturais experimentan cambios conformacionais ben definidos mediante al establecer interaccións no covalentes. Como obxectivo de este proxecto se plantea a síntesis de oligómeros quirales basados en unidades de piridina (zona de recoñecemento) e alenos (fonte de quiralidade).

La síntesis se levará a cabo mediante reaccións de acoplamiento cruzado catalizados por paladio. Los produtos obtidos se purifican por métodos cromatográficos y se caracterizan mediante la técnicas usuales, como RMN, Masas y espectroscopía de absorción y dicroísmo circular.



#### LUGAR DE REALIZACIÓN

Grupo S3 - Torre CACTI

**Nota:** As persoa(s) que presenta(n) este formulario comprométense a dispoñer dos medios materiais necesarios para realizar o traballo proposto.

(Asinar dixitalmente)

CID FERNANDEZ  
MARIA  
MAGDALENA -  
35553218W  
Firmado digitalmente  
por CID FERNANDEZ  
MARIA MAGDALENA -  
35553218W  
Fecha: 2021.10.13  
15:54:21 +02'00'

Firmado por ALVAREZ GARCIA  
JONATHAN - 35579125B el día  
13/10/2021 con un certificado  
emitido por AC FNMT Usuarios

# TFG-A 2021/2022

## Grao en Química

Liña de traballo fin de grao  
proposta por docente(s)

### 1 TITOR/A

APELIDOS E NOME **CID FERNÁNDEZ MAGDALENA** CORREO-E **mcid@uvigo.es**

DEPARTAMENTO C12 Química orgánica

### 2 COTITOR/A

APELIDOS E NOME **RUBIO PISABARRO VÍCTOR** CORREO-E **victor.rubio.pisabarro@uv**

DEPARTAMENTO / ORGANISMO C12 Química orgánica

### 3 PROPOSTA TFG

#### TÍTULO

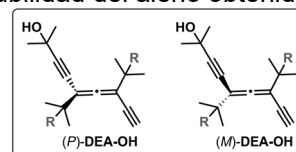
SINTESIS DE 1,3-DIETINILALENOS SOLUBLES EN AGUA

#### BREVE DESCRIPCIÓN DO CONTIDO, METODOLOXÍA E PLAN DE TRABALLO

Se propone la síntesis de 1,3-dietinilalenos solubles en agua empleando como etapa clave de la ruta sintética la reacción SN2' entre un éster debidamente funcionalizado y un alquino terminal, siendo este el paso que permitirá la obtención del aleno objetivo. Una vez establecida la ruta sintética, se estudiará la solubilidad del aleno obtenido y la separación del mismo en sus dos enantiómeros mediante HPLC quiral.

Metodología:

1. Revisión bibliográfica y búsqueda de condiciones de reacción.
2. Síntesis de los compuestos objetivo mediante reacciones en atmósfera inerte.
3. Caracterización de los compuestos sintetizados mediante las técnicas habituales.



#### LUGAR DE REALIZACIÓN

Torre Cacti-Anexo CITEXVI (Universidade de Vigo)

**Nota:** As persoa(s) que presenta(n) este formulario comprométense a dispoñer dos medios materiais necesarios para realizar o traballo proposto.

(Asinar dixitalmente)

CID FERNANDEZ  
MARIA  
MAGDALENA -  
35553218W

Firmado digitalmente  
por CID FERNANDEZ  
MARIA MAGDALENA -  
35553218W  
Fecha: 2021.10.13  
13:17:16 +02'00'

Firmado por RUBIO PISABARRO  
VICTOR - \*\*\*6139\*\* el día  
13/10/2021 con un certificado  
emitido por AC FNMT Usuarios

# TFG-A 2021/2022

## Grao en Química

Liña de traballo fin de grao  
proposta por docente(s)

### 1 TITOR/A

APELIDOS E NOME **Cid Fernández M Magdalena**

CORREO-E **mcid@uvigo.es**

DEPARTAMENTO **C12 Química orgánica**

### 2 COTITOR/A

APELIDOS E NOME

CORREO-E

DEPARTAMENTO / ORGANISMO -

### 3 PROPOSTA TFG

#### TÍTULO

*Síntese estereoselectiva e caracterización estrutural de peptidomiméticos de ácido cromoglicico*

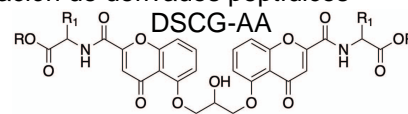
#### BREVE DESCRIPCIÓN DO CONTIDO, METODOLOXÍA E PLAN DE TRABALLO

O cromoglicato de sodio (DSCG), comercializado como INTAL®, presenta actividade antihistamínica e se utiliza en RMN como medio para a resolución de enantiómeros. Aquí se propón a preparación de derivados peptídicos enantiopuros de DSCG co fin de estudar o seu comportamento en RMN.

O paso clave de síntese consiste na formación dunha amida por adición da amina dun amino-ácido natural ao grupo carboxilato activado.

O plan de traballo consiste en preparar o axente activante do grupo carboxilato

e, a seguir, engadir as aminas correspondentes. O produto final aíllase do medio de reacción, purifícase e caracterízase utilizando diversas espectroscopías.



#### LUGAR DE REALIZACIÓN

Torre Cacti-grupo S3

**Nota:** As persoa(s) que presenta(n) este formulario comprométense a dispoñer dos medios materiais necesarios para realizar o traballo proposto.

(Asinar dixitalmente)

CID FERNANDEZ 2021.10.13  
MARIA 00:15:27  
MAGDALENA - +02'00'  
35553218W

**FORMULARIO DE PROPOSTA DE TRABALLO FIN DE GRAO  
TIPO A: OFERTADOS POR DOCENTES**

**CURSO:** \_\_\_\_ / \_\_\_\_

**Título:**

**Titor do Traballo Fin de Grao:**

Nome e apelidos do titor:

Departamento:

**Cotitor do Traballo Fin de Grao (de selo caso):**

Nome e apelidos do titor:

Departamento:

**Breve descrición do contido do Traballo Fin de Grao, indicando de forma concisa a metodoloxía e o plan de traballo:**

**Lugar onde se realizará o traballo:**

A presente solicitude establece o compromiso por parte do/s titor/es de dispoñer dos medios materiais necesarios para a realización do traballo proposto.

Vigo, ..... de ..... de .....

Vigo, ..... de ..... de .....

Sinatura do titor

Sinatura do cotitor

**COMISION DO TRABALLO DE FIN DE GRAO**



**TFG-A 2021/2022**  
**Grao en Química**Liña de traballo fin de grao  
proposta por docente(s)**1 TITOR/A**APELIDOS E NOME **Hermida Ramón, Jose Manuel** CORREO-E jose\_hermida@uvigo.es

DEPARTAMENTO C11 Química física

**2 COTITOR/A**APELIDOS E NOME **Marcos Mandado Alonso** CORREO-E mandado@uvigo.es

DEPARTAMENTO / ORGANISMO C11 Química física

**3 PROPOSTA TFG****TÍTULO**

*Deseño computacional de unha pinza molecular para la captura de especies mediante procesos activados por luz a través de interruptores moleculares.*

**BREVE DESCRICIÓN DO CONTIDO, METODOLOXÍA E PLAN DE TRABAJO**

As pinzas moleculares son estruturas que poden actuar coma receptores doutras moléculas neutras ou ions debido a unha enerxía potencial de apertura/peche relativamente baixa. Neste traballo propónse un estudo de pinzas moleculares onde o proceso de apertura/peche sexa controlado mediante un proceso fotoquímico, coa introducción de interruptores moleculares.

Comezaráse realizando cálculos teóricos para avaliar a enerxía entre interruptores moleculares que poderían formar as ramas da pinza e exemplos de especies que poden ser capturadas. En función das enerxías obtidas decidirase o deseño das ramas que se empregarán para a captura de distintos tipos de especies. A continuación, realizarase un estudo do proceso de fotoactivación que permite a apertura e peche da pinza, así como dos

**LUGAR DE REALIZACIÓN**

Facultade de Química

**Nota:** As persoa(s) que presenta(n) este formulario comprométense a dispoñer dos medios materiais necesarios para realizar o traballo proposto.

(Asinar dixitalmente)

**MANDADO  
ALONSO MARCOS  
- 36112908X**

Firmado digitalmente por MANDADO ALONSO  
MARCOS - 36112908X  
Nombre de reconocimiento (DN): c=ES,  
serialNumber=IDCES-36112908X,  
givenName=MARCOS, sn=MANDADO ALONSO,  
cn=MANDADO ALONSO MARCOS - 36112908X  
Fecha: 2021.10.10 11:42:17 +02'00'

Firmado por HERMIDA RAMON JOSE MANUEL -  
36104135T el día 10/10/2021 con un certificado  
emitido por AC FNMT Usuarios

COMISIÓN TFG QUÍMICA ( [decanatoquimica@uvigo.es](mailto:decanatoquimica@uvigo.es) )

# TFG-A 2021/2022

## Grao en Química

Liña de traballo fin de grao  
proposta por docente(s)

### 1 TITOR/A

APELIDOS E NOME **Otero Martínez Nicolás** CORREO-E nom05@uvigo.es

DEPARTAMENTO C11 Química física

### 2 COTITOR/A

APELIDOS E NOME **Estévez Guance Laura** CORREO-E lestevez@uvigo.es

DEPARTAMENTO / ORGANISMO C11 Química física

### 3 PROPOSTA TFG

#### TÍTULO

*Estudo químico cuántico do CO adsorbido en nanobandas de grafeno*

#### BREVE DESCRICIÓN DO CONTIDO, METODOLOXÍA E PLAN DE TRABALLO

Esta proposta de TFG ten como obxectivo o estudo mediante métodos da química cuántica da adsorción do CO sobre nanobandas de grafeno, co gallo de descubrir o efecto dos bordes das bandas na adsorción do CO no grafeno. Isto pode dar información do que ocorre experimentalmente cando o CO está preto de superficies que inclúen imperfeccións ou bordes.

Empregarase principalmente metodoloxía da química cuántica para determinar propiedades como a enerxía, distinguir se a función de onda do sistema é estable e se o sistema é un mínimo local da MEP mediante as aproximacións Hartree-Fock e Kohn-Sham. En entornos GNU/Linux, empregarase Gaussian e software de

#### LUGAR DE REALIZACIÓN

Facultade de Química - Departamento Química Física

**Nota:** As persoa(s) que presenta(n) este formulario comprométense a dispoñer dos medios materiais necesarios para realizar o traballo proposto.

(Asinar dixitalmente)

Asinado dixitalmente por OTERO MARTINEZ  
NICOLAS - 36117953H o día 11/10/2021 cun

ESTEVEZ  
GUIANCE LAURA  
- 76824896C

Firmado digitalmente  
por ESTEVEZ GUIANCE  
LAURA - 76824896C  
Fecha: 2021.10.11  
12:19:32 +02'00'

COMISIÓN TFG QUÍMICA ( [decanatoquimica@uvigo.es](mailto:decanatoquimica@uvigo.es) )

# TFG-A 2021/2022

## Grao en Química

Liña de traballo fin de grao  
proposta por docente(s)

## 1 TITOR/A

APELIDOS E NOME **Otero Martínez Nicolás** CORREO-E nom05@uvigo.es

DEPARTAMENTO C11 Química física

## 2 COTITOR/A

APELIDOS E NOME **Estévez Guance Laura** CORREO-E lestevez@uvigo.es

DEPARTAMENTO / ORGANISMO C11 Química física

## 3 PROPOSTA TFG

## TÍTULO

*Descrición do enlace dativo en termos de compoñentes NLMO das cuncas atómicas QTAIM*

## BREVE DESCRICIÓN DO CONTIDO, METODOLOXÍA E PLAN DE TRABALLO

Tipicamente, o enlace dativo interprétase como de tipo covalente no que se implican dous electróns que proveñen dun átomo dunha base de Lewis compartidos con outro átomo dun ácido de Lewis. Porén, estudos previos cuestionan a explicación tradicional deste tipo de enlace e postulan un elevado carácter iónico.

Empregando cálculos de química cuántica molecular con diferentes niveis teóricos (Hartree-Fock e diferentes funcionais da DFT) obtéranse densidades electrónicas localizadas para diversos sistemas que conteñen enlace dativo (SO<sub>2</sub>, O<sub>3</sub>, catións H<sub>3</sub>O<sup>+</sup> e NH<sub>4</sub><sup>+</sup>, complexos R<sub>3</sub>-N-BX<sub>3</sub>, con R=CH<sub>3</sub>, H e X=H,F). Para estas densidades obtéranse as cuncas atómicas utilizando a teoría cuántica de átomos en moléculas (QTAIM nas súas siglas en

## LUGAR DE REALIZACIÓN

Facultade de Química - Departamento Química Física

**Nota:** As persoa(s) que presenta(n) este formulario comprométense a dispoñer dos medios materiais necesarios para realizar o traballo proposto.

(Asinar dixitalmente)

Asinado dixitalmente por OTERO MARTINEZ NICOLAS -  
36117953H o día 11/10/2021 cun certificado emitido por AC

ESTEVEZ  
GUIANCE LAURA  
- 76824896C

Firmado dixitalmente  
por ESTEVEZ GUIANCE  
LAURA - 76824896C  
Fecha: 2021.10.11  
12:23:22 +02'00'

COMISIÓN TFG QUÍMICA ( [decanatoquimica@uvigo.es](mailto:decanatoquimica@uvigo.es) )

**RECIBIDO**

Por Decanato Química fecha 9:00 , 11/10/2021

Universidade de Vigo

Facultade de Química

# TFG-A 2021/2022

## Grao en Química

Liña de traballo fin de grao  
proposta por docente(s)**1 TITOR/A**APELIDOS E NOME **Mandado Alonso Marcos**CORREO-E **mandado@uvigo.es**

DEPARTAMENTO C11 Química física

**2 COTITOR/A**APELIDOS E NOME **Ramos Berdullas Nicolás**CORREO-E **nicolas.ramos@uvigo.es**

DEPARTAMENTO / ORGANISMO C11 Química física

**3 PROPOSTA TFG****TÍTULO***Espintrónica: simulación computacional do transporte electrónico e de espín en nanotubos de carbono***BREVE DESCRICIÓN DO CONTIDO, METODOLOXÍA E PLAN DE TRABALLO**

A electrónica e a espintrónica molecular son dous campos estreitamente interrelacionados onde dispositivos creados a escala molecular realizan diferentes funcións, fíos condutores, rectificadores, switches ou portas lóxicas, dentro dun circuíto electrónico. Tratándose dun campo cuxo desenvolvemento tecnolóxico é extremadamente complexo, a simulación computacional é unha peza fundamental no deseño de moléculas que poidan realizar as funcións mencionadas anteriormente.

Neste TFG propónse realizar un estudo computacional do transporte electrónico e de espín en nanotubos de carbono de diferente morfoloxía. Estes nanotubos presentan estados electrónicos poliradicales, con diferente multiplicidade de espín, polo que resultan de gran interese para o campo da espintrónica a escala molecular e

**LUGAR DE REALIZACIÓN**

Facultade de Química

**Nota:** As persoa(s) que presenta(n) este formulario comprométense a dispoñer dos medios materiais necesarios para realizar o traballo proposto.

(Asinar dixitalmente)

**MANDADO**  
**ALONSO MARCOS**  
- 36112908X

Firmado digitalmente por MANDADO  
ALONSO MARCOS - 36112908X  
Nombre de reconocimiento (DN): c=ES,  
serialNumber=IDCES-36112908X,  
givenName=MARCOS, sn=MANDADO  
ALONSO, cn=MANDADO ALONSO MARCOS  
- 36112908X  
Fecha: 2021.10.07 17:24:52 +02'00'

**RAMOS**  
**BERDULLAS**  
**NICOLAS -**  
**44842391G**

Firmado digitalmente  
por RAMOS  
BERDULLAS NICOLAS  
- 44842391G  
Fecha: 2021.10.08  
07:46:08 +02'00'

COMISIÓN TFG QUÍMICA ( [decanatoquimica@uvigo.es](mailto:decanatoquimica@uvigo.es) )

**TFG-A 2021/2022**  
**Grao en Química**Liña de traballo fin de grao  
proposta por docente(s)**1 TITOR/A**APELIDOS E NOME **Peña Gallego, Angeles** CORREO-E **mpena@uvigo.es**

DEPARTAMENTO C11 Química física

**2 COTITOR/A**APELIDOS E NOME **Núñez Sánchez, Sara** CORREO-E **S.Nunez-Sanchez@uvigo**

DEPARTAMENTO / ORGANISMO C11 Química física

**3 PROPOSTA TFG****TÍTULO***Estudio de las propiedades moleculares de agregados J***BREVE DESCRICIÓN DO CONTIDO, METODOLOXÍA E PLAN DE TRABALLO**

En el grupo de investigación se han sintetizado diferentes agregados J con una amplia respuesta desde el visible al infrarrojo. Sus aplicaciones son múltiples, abarcando campos tan diversos como la colección de energía solar o la nanomedicina.

En este proyecto proponemos al alumno/a modelar las propiedades moleculares de estos agregados y cotejarlos con resultados experimentales. Este estudio permitirá al alumno/a entender el comportamiento de estos sistemas supramoleculares y cómo transformarlos para obtener nuevas funcionalidades tecnológicas.

**LUGAR DE REALIZACIÓN**

Facultad de Química y CINBIO

**Nota:** As persoa(s) que presenta(n) este formulario comprométense a dispoñer dos medios materiais necesarios para realizar o traballo proposto.

(Asinar dixitalmente)



Firmado digitalmente  
por PEÑA GALLEGO  
MARIA DE LOS ANGELES  
- DNI 36124053T  
Fecha: 2021.10.14  
08:16:40 +02'00'

Firmado por NUÑEZ  
SANCHEZ, SARA (FIRMA) con  
un certificado emitido  
por AC DNIE 006

**TFG-A 2021/2022**  
**Grao en Química**Liña de traballo fin de grao  
proposta por docente(s)**1 TITOR/A**APELIDOS E NOME **Peña Gallego, Angeles**CORREO-E **mpena@uvigo.es**DEPARTAMENTO **C11 Química física****2 COTITOR/A**APELIDOS E NOME **Alonso Gómez, José Lorenzo**CORREO-E **lorenzo@uvigo.es**DEPARTAMENTO / ORGANISMO **C12 Química orgánica****3 PROPOSTA TFG****TÍTULO***Estudio computacional de sistemas que presenten orbitales frontera con carácter helicoidal***BREVE DESCRIPCIÓN DO CONTIDO, METODOLOXÍA E PLAN DE TRABALLO**

En previos traballos do grupo de investigación se han sintetizado y estudiado interesantes sistemas que presentan orbitales moleculares helicoidales.

Además de su belleza y de su interés a nivel teórico, se considera que proporcionarán a los sistemas propiedades especiales que los convertirán en candidatos idóneos para aplicaciones en campos de gran relevancia como la espintrónica o la conducción molecular.

Los sistemas sintetizados hasta el momento en nuestro grupo de investigación presentan estos orbitales moleculares en orbitales diferentes de HOMO y LUMO pero se espera que las propiedades de interés se vean amplificadas si conseguimos que sean los orbitales frontera los que presentan carácter helicoidal.

**LUGAR DE REALIZACIÓN**

Facultad de Química

**Nota:** As persoa(s) que presenta(n) este formulario comprométense a dispoñer dos medios materiais necesarios para realizar o traballo proposto.

(Asinar dixitalmente)

Firmado digitalmente por PEÑA  
GALLEGO MARIA DE LOS  
ANGELES - DNI 36124053T  
Fecha: 2021.10.11 23:48:36  
+02'00'

Firmado digitalmente por  
ALONSO GOMEZ JOSE  
LORENZO - 36124871J  
Fecha: 2021.10.13  
11:16:09 +02'00'