Projecte per beques d'estiu 2016

Dades del projecte:

Títol:	Catàlisi bimetàl·lica
Supervisor:	Dr. Albert Poater
E-mail supervisor:	albert.poater@udg.edu
Grup de recerca:	DIMOCAT
Destinat a estudiants:	3r any / 4art any
Lloc de treball:	Fac. Ciències / Parc UdG
Places ofertes:	2 (3r any, 4art any)
Data d'inici:	01/07/2016
Data d'acabament:	31/07/2016 (31/08/2016 per alumne de 4art any)
Seguiment:	Diària

Coneixements específics que ha de tenir l'estudiant: Estar cursant o haver cursat el tercer curs de química

Estudis en curs requerits: Ser estudiant de química de tercer o quart.

Formació que adquirirà l'estudiant en realitzar aquesta activitat: Coneixements bàsics de química quàntica, i familiarització amb el programari de computació (Gaussian, GaussView, ChemCraft), tècniques de caracterització de la reactivitat química i aprenentatge en l'escriptura d'un treball científic en anglès.

Descripció de l'activitat que ha de fer l'estudiant: Descriure el mecanisme de reaccions on dues unitats metàl·liques són necessàries per la catàlisi, sigui fixació de CO_2 funcionalització d'alquins o cianoalquilació. En cas de ser convenient i/o necessari, el treball podrà ser utilitzat com a part del treball d'empresa o treball de fi de grau.

Referències:

[1] V. D'Elia, H. Dong, A. Rossini, C. Widdifield, S. V. C. Vummaleti, Y. Minenkov, A. Poater, E. Abou-Hamad, J. Pelletier, L. Cavallo, L. Emsley, J. M. Basset, *J. Am. Chem. Soc.* **2015**, *137*, 7728-7739.

[2] V. D'Elia, H. Dong, A. Rossini, C. Widdifield, S. V. C. Vummaleti, Y. Minenkov, A. Poater, E. Abou-Hamad, J. Pelletier, L. Cavallo, L. Emsley, J. M. Basset, *Chem. Eur. J.* **2014**, *20*, 11870-11882.

[3] A. Gómez-Suárez, Y. Oonishi, A. R. Martin, S. V. C. Vummaleti, D. J. Nelson, D. B. Cordes, A. M. Z. Slawin, L. Cavallo, S. P. Nolan, A. Poater, *Chem. Eur. J.* **2016**, *22*, 1125-1132.