Projecte per beques d'estiu 2016

Dades del projecte:

Títol:	Mössbauer espectroscòpia de metalls de transició amb química computacional
Supervisor:	Dr. Marcel Swart
E-mail supervisor:	marcel.swart@udg.edu
Grup de recerca:	QTMEM
Destinat a estudiants:	3r i 4t any
Lloc de treball:	Fac. Ciències
Places ofertes:	1 (3r any) o 1 (4t any)
Data d'inici:	01/06/2016 / a concretar amb l'estudiant
Data d'acabament:	15/09/2016 / a concretar amb l'estudiant
Seguiment:	Diària / Setmanal

Coneixements específics que ha de tenir l'estudiant:
Haver cursat alguna assignatura de química computacional.

Estudis en curs requerits:
Grau en química.

Formació que adquirirà l'estudiant en realitzar aquesta activitat:
Formació en l'ús del programa ADF i QUILD. Determinació de estructures 3D de molècules i/o complexos de metalls de transició. Coneixements de l'espectroscòpia de Mössbauer.

Descripció de l'activitat que ha de fer l'estudiant:
Mössbauer espectroscòpia és una tècnica molt precisa per determinar l'estat d'oxidació i/o l'estat de spin de complexos de ferro, i recentment s'ha usat per resoldre l'estat d'oxidació d'un complex de ferro-oxigen encapçalat per escandi.[1,2] Es va demostrar[2] que la predicció de Fe(III)[1] va ser correcte, en contrast de la proposta original de Fe(IV).[3]
Recentment, hem construït un nou mètode[4] per determinar els paràmetres Mössbauer de complexos de ferro. En aquest projecte volem ampliar el nou mètode per complexos d'or, on també hi ha hagut discussió sobre l'estat d'oxidació d'uns complexos, es a dir, si són Au(I) o Au(III). Estudiarem alguns complexos on l'estat d'oxidació està conegut, i alguns altres dels quals hi hagi discussió. Optimitzarem la geometria dels complexos, i determinarem els paràmetres Mössbauer per tots complexos (amb el nou mètode[4]) per contrarestar les indicacions experimentals i/o computacionals.

Referències

1) M. Swart, *Chem. Commun.* **2013**, *49*, 6650-6652
2) J. Prakash, G.T. Rohde, K.K. Meier, A.J. Jasniewski, K.M. Van Heuvelen, E. Münck and L. Que, *J. Am. Chem. Soc.* **2015**, *137*, 3478-3481
3) S. Fukuzumi, Y. Morimoto, H. Kotani, P. Naumov, Y.-M. Lee and W. Nam, *Nature Chem.* **2010**, *2*, 756–759
4) A. Romero-Rivera and M. Swart, *(to be) submitted* **2016**