

## Projecte per beques d'estiu 2017

### Dades del projecte:

Títol:	Computational study of different RAHB motifs
Supervisor:	Dr. Silvia Simon
E-mail supervisor:	silvia.simon@udg.edu
Grup de recerca:	DIMOCAT
Destinat a estudiants:	3r i 4t any
Lloc de treball:	Fac. Ciències
Places ofertes:	1 (3r any) i 1 (4t any)
Data d'inici:	15/06/2017 (concreció final amb l'estudiant)
Data d'acabament:	31/07/2017 (concreció final amb l'estudiant)
Seguiment:	Diària

### Coneixements específics que ha de tenir l'estudiant:

Química, pràctiques de QF

### Estudis en curs requerits:

Estudi de Química o Biotecnologia

### Formació que adquirirà l'estudiant en realitzar aquesta activitat:

L'estudiant adquirirà destresa en la utilització d'eines de química computacionals per tal de descriure compostos amb interaccions de hidrogen.

### Descripció de l'activitat que ha de fer l'estudiant:

En un estudi recent de Mahmudoy *et al.*<sup>1</sup> s'ha recollit tot una sèrie de sistemes orgànics a on la formació de un enllaç de hidrogen assistit per ressonància és una de les forces que ajuda a la seva síntesis. En aquest cas concret, l'estudiant en pràctiques, utilitzarà les eines de modelatge en química computacional per tal de poder explicar perquè hi ha aquesta extraestabilització. Es tracta de una línia de recerca dins del grup en qüestió. L'estudiant, per altre banda, podrà formar part de un grup de recerca i veure com es treballa en aquest entorn.

### Referències

1 - Mahmudoy and Pombeiro, Chem. Eur. J, 2016, 22, 16356