

Projecte per beques d'estiu 2017

Dades del projecte:

Títol:	Estudi de circuits moleculars de màxima deslocalització electrònica en sistemes aromàtics Hückel, Baird i Möbius
Supervisor:	Dr. Miquel Solà Puig
E-mail supervisor:	miquel.sola@udg.edu
Grup de recerca:	DIMOCAT
Destinat a estudiants:	3r any
Lloc de treball:	Fac. Ciències
Places ofertes:	1 (3r any)
Data d'inici:	a concretar amb l'estudiant
Data d'acabament:	a concretar amb l'estudiant
Seguiment:	Setmanal

Coneixements específics que ha de tenir l'estudiant:

Tenir coneixements elementals de química quàntica i termodinàmica.

Estudis en curs requerits:

Termodinàmica

Experimentació en Química Física

Formació que adquirirà l'estudiant en realitzar aquesta activitat:

Aprenderà UNIX per fer càlculs al clúster de l'IQCC i a utilitzar programes de mecànica quàntica estàndard per fer optimitzacions de geometria i programes propis per fer càlculs d'índexs d'aromaticitat.

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

Optimització de geometries de sistemes aromàtics Hückel, Baird i Möbius

Càlculs FLU amb separació α/β

Instal·lació del programa ACID

Referències

1. E. Matito, M. Duran and M. Solà. *The Aromatic Fluctuation Index (FLU): A New Aromaticity Index Based on Electron Delocalization*. **J. Chem. Phys.**, **122** (2005) 014109. **Erratum íbid**, **125** (2006) 059901.
2. K. Jorner, F. Feixas, R. Ayub, R. Lindh, M. Solà and H. Ottosson. *Analysis of a Compound with Triplet States Stabilized by Potentially Baird-Aromatic [10]Annulenylic Dicationic Rings*. **Chem. Eur. J.**, **22** (2016) 2793-2800.
3. O. El Bakouri, M. Duran, J. Poater, F. Feixas and M. Solà. *Octahedral Aromaticity in $^{2S+1}A_{1g} X_6^q$ Clusters ($X = Li-C$ and $Be-Si$, $S = 0-3$, and $q = -2-+4$)*. **Phys. Chem. Chem. Phys.**, **18** (2016) 11700-11706,
4. M. Garcia-Borràs, S. Osuna, J. M. Luis and M. Solà. *Rationalizing the Relative Abundances of TNT-based Endohedral Metallofullerenes from Aromaticity Measures*. **Chem. Commun.**, **53** (2017) 4140-4143