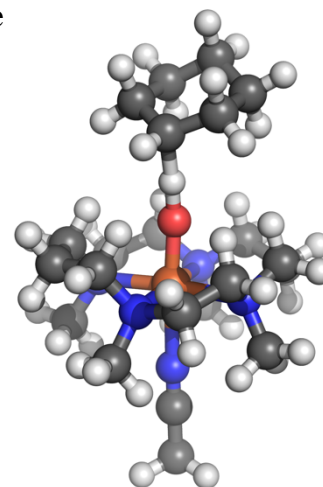


Projecte per beques d'estiu 2017

Dades del projecte:

Títol:	Perquè níquel i no ferro, manganès o coure
Supervisor:	Prof. 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 / Parc UdG
Places ofertes:	1 (3r any) i 1 (4t any)
Data d'inici:	06/2016 / a concretar amb l'estudiant
Data d'acabament:	10/2016 / a concretar amb l'estudiant
Seguiment:	Diària



Coneixements específics que ha de tenir l'estudiant:

Es valorarà haver cursat algunes assignatures de química computacional i de química inorgànica. Contactar prèviament per establir horaris (tan horaris com data d'inici/acabament són flexibles).

Estudis en curs requerits:

Grau en química.

Formació que adquirirà l'estudiant en realitzar aquesta activitat:

Ús d'eines de química computacional (ADF, QUILD, etc.) i recursos supercomputacionals. Iniciar-se en la recerca científica, anàlisi dels resultats obtinguts i descriure'ls en un report resumit que podrà convertir-se en un article científic. Iniciar-se en l'ús d'anglès com a llengua primera per la ciència.

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

La reactivitat de complexos de metalls de transició és bastant divers amb reaccions d'oxidació, superòxid dismutasa, catalasa, etc., amb diferents metalls associats amb les reaccions. Aquí volem entendre el perquè del Mn per catalasa, el Fe per oxidació, amb models senzills i mètodes de química computacional que són àgil i adient.^[1] Això ens facilita estudiar la reactivitat intrínseca dels metalls en reaccions de transferència d'àtoms d'hidrogen (HAT) i d'oxigen (OAT), amb rellevància per estudis experimentals.^[2-6] A més, la caracterització dels reactius i intermedis amb espectroscòpia computacional dona accés directament a comparació amb dades experimentals (EPR, IR, (r)Raman, UV-Vis).

Referències

- [1] *Acc. Chem. Res.* **2016**, *49*, 2690-2697, www.dx.doi.org/10.1021/acs.accounts.6b00271
- [2] *Inorg. Chem.* **2017**, *56*, 470-479, www.dx.doi.org/10.1021/acs.inorgchem.6b02378
- [3] *J. Am. Chem. Soc.* **2016**, *138*, 14362-14370, www.dx.doi.org/10.1021/jacs.6b08406
- [4] *J. Am. Chem. Soc.* **2016**, *138*, 13143-13146, www.dx.doi.org/10.1021/jacs.6b07633
- [5] *Chem. Eur. J.* **2015**, *21*, 3785-3790, www.dx.doi.org/10.1002/chem.201406485
- [6] manuscrits enviats i en preparació, en col·laboració amb grups experimentals [2017]