

ANEXO I
PROPOSTA DE PROXECTOS DE INVESTIGACIÓN STEMbach

Dirección do proxecto	
Nome: Ricardo Mosquera Castro	
Enderezo electrónico: mosquera@uvigo.es	Teléfono: 986 813 808
Co-dirección do proxecto	
Nome: Ángeles Peña Gallego	
Enderezo electrónico: mpena@uvigo.es	Teléfono: 9860813480
Bienio	2020 - 2022
Número de participantes (máx. 4)	

Título

Estudo estrutural de complexos entre dióxido de carbono e compostos de níquel.

Resumo

Analízase a densidade electrónica de modelos de diversos complexos LNi-CO₂ tratando de establecer relacións entre características estruturais e a estabilidade do complexo. Para isto realízanse cálculos de química cuántica e interprétanse os resultados utilizando técnicas de análise de densidade electrónica, fundamentalmente a teoría cuántica de átomos nas moléculas.

Obxectivo

O obxectivo formativo é introducir ao alumnado nalgúns métodos de química cuántica e de computadora. Para facer o tema máis atractivo propónse o estudo duns sistemas con potencial interese práctico. O obxectivo final é analizar como a estrutura do composto de Ni varía a súa capacidade para unirse ao CO₂.

Plan de traballo

1. Formación básica en métodos de cálculo da química cuántica.
2. Familiarización co emprego de programas que aplican os métodos anteriores.
3. Realización de cálculos Hartree-Fock e DFT para sistemas modelos dos complexos.
4. Formación básica en métodos de análise da densidade electrónica.
5. Análise de resultados da densidade electrónica obtida coa teoría cuántica de átomos nas moléculas.