



LISTADO DEL PLAN DE INVESTIGACIÓN

Tipo y número de documento: NIF 39925882K **Apellidos y nombre del doctorando:** AGUIRRE FONDEVILA, ADIRAN JOSU DE

Centro: 77 Escuela de Posgrado y Doctorado **Núm. expediente:** 88

Plan de estudios: 7703 Programa de Doctorado en Ciencia y Tecnología Química

Curso de inicio: 2015-16

Tutor/a: FELIU MASERAS CUNÍ

Director/a: FELIU MASERAS CUNÍ

2015-16

TÍTULO DE LA TESIS REGISTRADA	Estado:	En revisión	Responsable	FELIU MASERAS CUNÍ FELIU MASERAS CUNÍ
Título de la tesis	Computational study of transition metal photocatalytic reactions.			
PLAN DE INVESTIGACIÓN (PRIMER CURSO)	Estado:	Aceptada	Responsable	FELIU MASERAS CUNÍ
Objectius a assolir	1. Clarificar el mecanisme d'actuació dels fotosensititzadors en reaccions catalitzades per metalls de transició on aquests complexos desenvolupen un paper crucial durant la catàlisi. 2. Contribuir a la creació d'un model global de fotocatalisi computacional.			
Eines o metodologies	Aquest és un projecte de química computacional, per aquesta raó, les nostres eines principals son els ordenadors. Disposem de diversos recursos computacionals al nostre centre. La majoria de les màquines de càlcul es concentre a un cluster tipus Beowulf amb 120 nodes i un total de 100 nuclis. També disposem d'accés a màquines de càlcul públiques fora del nostre institut, per exemple; CSUC (Centre de Serveis Universitaris de Catalunya) , entre altres. El principal programa que s'utilitzarà serà el Gaussian09, degut a la gran varietat de funcionals i mètodes disponibles, la seva capacitat d'optimització i la fàcilitat de generació dels inputs i la interfase gràfica associada GaussView. Altres programes de càlculs també podran ser utilitzats quan sigui oportú (NWChem, Orca, Turbomole, MacroModel, Tinker) per càlculs més específics.			
Planificació del desenvolupament de la tesi	Trimestre 1-4: Identificació d'una metodologia apropiada pel tractament dels sistemes fotocatalítics. Trimestre 5-8: Clarificació de mecanismes de processos fotocatalítics. Esquema general per la descripció de reaccions fotocatalítics mitjançant aducte d'electro-donació. Trimestre 9-12 Esquema general per la descripció de reaccions de complexos de metalls de transició com fotosensititzadors. Poposta de nous fotosensititzadors per un testeig experimental.			
Mitjans addicionals per a la investigació	Assistència i participació a congressos internacionals. Estada/es (3 a 6 mesos) en diferents grups relacionats amb la química computacional que utilitzen diferent metodologia i/o eines per la investigació.			
PLAN DE INVESTIGACIÓN (SEGUNDO CURSO)	Estado:	Aceptada	Responsable	FELIU MASERAS CUNÍ
Objetivos				
Metodología				
Planificación del desarrollo de la tesis				
Herramientas y técnicas a utilizar				



Universitat Rovira i Virgili

LISTADO DEL PLAN DE INVESTIGACIÓN

Tipo y número de documento: NIF 39925882K **Apellidos y nombre del doctorando:** AGUIRRE FONDEVILA, ADIRAN JOSU DE

Centro: 77 Escuela de Posgrado y Doctorado **Núm. expediente:** 88

Plan de estudios: 7703 Programa de Doctorado en Ciencia y Tecnología Química

Curso de inicio: 2015-16

Tutor/a: FELIU MASERAS CUNÍ

Director/a: FELIU MASERAS CUNÍ

Firmas:

4 de abril de 2019