

**Departamento de Física**  
 Proyecto de Ingeniería 1  
 Enero-mayo 2013  
 Propuesta de proyecto de investigación

Asesor proponente del Proyecto: José Antonio Sánchez Fernández

<b>Título del proyecto</b>	Estudio de las reacciones químicas y reactividad usando los orbitales tipo Gausiano: Desarrollo computacional para encontrar la densidad electrónica y reactividad.
<b>Objetivo del proyecto</b>	Desarrollo de un sistema de cálculo teórico para obtener los parámetros químicos (calor de formación, simetría, orden de enlace, LUMO, HOMO), reactividad química y susceptibilidad óptica de cromóforos con actividad óptica no lineal usando el software "Gaussians".
<b>Descripción del Proyecto</b>	Por medio del un software específico, desarrollar un sistema de cálculo teórico de medición de la susceptibilidad óptica de materiales cromóforos en base al silicio, quitosano, rojo disperso 1 y naranja disperso 3. Por medio de los datos teóricos calculados con el diseño de un sistema de códigos se pretende mejorar las vías de obtención de materiales ópticos con alta hidrofobicidad y pobre dispersión óptica de los rayos UV y NIR (Infrarrojo Cercano). Con el diseño, incluso, se obtendrán los parámetros espectroscópicos como Resonancia Magnética Nuclear de compuestos sintetizados experimentalmente.
<b>Conocimientos y habilidades requeridos por el estudiante</b>	Química y Física de materiales poliméricos y materiales híbridos (Dos fases: una orgánica y otra inorgánica). Conocimientos básicos de óptica y espectroscopia.
<b>Equipo y consumibles necesarios para el proyecto y su disponibilidad</b>	Espacio de laboratorio equipado para síntesis química y análisis instrumental: Pruebas espectroscópica, calorimétricas y de microscopia. Compuestos de silicio (alquil silanos), otros reactivos básicos para el proyecto, y kits de reacción (250 ml). Consumibles de vidrio para laboratorio. Acceso a equipos de caracterización espectroscópica y microscópica. Software "Gaussian" y Software "CHEMOFFICE".
<b>Resultados esperados</b>	Modelo computacional para cálculo de la reactividad química, susceptibilidad óptica, y espectroscópica de materiales con actividad óptica no lineal.