



1. DATOS BÁSICOS DEL TFG:

Título: Acoplamiento espín-órbita en lantanoides

Descripción general (resumen y metodología):

Se trataría en este trabajo de realizar una aproximación teórica a los desdoblamientos ocasionados por el acoplamiento espín-órbita en lantanoides sobre diferentes configuraciones electrónicas fn.

1. El estudiante deberá familiarizarse con el manejo de diferentes programas: protocolo de intercambio de ficheros, química cuántica, visualización y edición molecular.
2. Envío de trabajos para el cálculo de los diferentes iones.
3. Discusión de las propiedades
4. Generación de un informe final

Tipología: Estudio de casos, teóricos o prácticos, relacionados con la temática del Grado.

Objetivos planteados:

- Conexiones a equipos remotos
- Conocimiento de LINUX básico
- Manejo de programas de Química Cuántica
- Comprensión y análisis de los resultados
- Estudio de propiedades moleculares

Bibliografía básica:

Recomendaciones y orientaciones para el estudiante:

Plazas: 1

2. DATOS DEL TUTOR/A:

Nombre y apellidos: ANTONIO JOSÉ MOTA ÁVILA

Ámbito de conocimiento/Departamento: QUÍMICA INORGÁNICA

Correo electrónico: mota@ugr.es

3. COTUTOR/A DE LA UGR (en su caso):

Nombre y apellidos:

Ámbito de conocimiento/Departamento:

Correo electrónico:

4. COTUTOR/A EXTERNO/A (en su caso):

Nombre y apellidos:

Correo electrónico:

Nombre de la empresa o institución:

Dirección postal:

Puesto del tutor en la empresa o institución:

5. DATOS DEL ESTUDIANTE:

Nombre y apellidos:

Correo electrónico: