



1. DATOS BÁSICOS DEL TFG:

Título: Factores que pueden afectar al desdoblamiento a campo cero en complejos de níquel(II)

Descripción general (resumen y metodología):

El desdoblamiento a campo cero (ZFS) de complejos de níquel es una característica que suele determinarse experimentalmente como en término adicional en el ajuste de la constante de acoplamiento magnético isotrópico. Se trataría de calcular dichas constantes y el valor de ZFS en forma de anisotropía magnética.

1. El estudiante deberá familiarizarse con el manejo de diferentes programas: protocolo de intercambio de ficheros, química cuántica, y visualización y edición molecular.
2. Envío de trabajos para el cálculo de las diferentes propiedades magnéticas a partir de compuestos teóricos basados en un estudio sistemático, así como de la base de datos cristalográfica de Cambridge.
3. 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: