



### 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:**

**Centro de convenio Externo:**

**5. DATOS DEL ESTUDIANTE:**

**Nombre y apellidos:**

**Correo electrónico:**