



UNIVERSIDAD  
DE GRANADA

## PROPUESTA DE TRABAJO FIN DE GRADO

GRADO EN QUÍMICA

CURSO 2020/2021



Facultad de Ciencias

### PROPUESTA DEL DEPARTAMENTO

#### DATOS BÁSICOS DEL TFG

TÍTULO TFG	Resolución y refinamiento de estructuras de minerales mediante difracción de rayos X de polvo		
CÓDIGO TFG <sup>(1)</sup>	MP-20/21-01	TIPOLOGÍA <sup>(2)</sup>	A1

<sup>(1)</sup> A rellenar por la dirección del dpto

OFERTADO POR	Profesor del Departamento	<input checked="" type="checkbox"/>
	Profesor del Departamento junto con Empresa o Institución	<input type="checkbox"/>

#### DATOS DE LA ENTIDAD (donde se va a realizar el TFG)

CENTRO (Departamento, institución o empresa)	Dept. Mineralogía y Petrología, Universidad de Granada		
DIRECCIÓN POSTAL	Av. Fuentenueva S/N		
LOCALIDAD	GRANADA	C.P.	18071

#### DATOS DEL TUTOR

<b>TUTOR 1 (Tutor académico en caso de realizar el TFG en una empresa o institución)</b>			
NOMBRE Y APELLIDOS	RODRIGUEZ NAVARRO, ALEJANDRO		
DEPARTAMENTO	MINERALOGIA Y PETROLOGIA		
CARGO <sup>(3)</sup>	PROFESOR TITULAR UNIVERSIDAD		
TELÉFONO	958240059	E-MAIL	anava@ugr.es

Rellenar en caso de haber un segundo tutor

<b>TUTOR 2</b>			
NOMBRE Y APELLIDOS			
DEPARTAMENTO			
CARGO <sup>(3)</sup>			
TELÉFONO		E-MAIL	
<b>TUTOR DE LA EMPRESA O INSTITUCIÓN (Rellenar en caso de realizar el TFG en una empresa o institución)</b>			
NOMBRE Y APELLIDOS			
EMPRESA			
TITULACIÓN			
TELÉFONO		E-MAIL	

<sup>(3)</sup> Catedrático, Profesor Titular, Profesor Contratado Doctor,....

## MEMORIA DE LA PROPUESTA DE TFG

### Introducción.

La resolución de la estructura de una sustancia química cristalina sencilla (por ejemplo, un mineral), mediante difracción de rayos X, permite determinar las coordenadas de cada uno de los átomos de la molécula con una gran precisión. El método de difracción de polvo permite analizar sustancias de difícil cristalización por lo que es más general que el método de monocristal. Los métodos de resolución de estructuras se basan en el ajuste progresivo de un modelo de la estructura, en el que se modifican progresivamente las posiciones de los átomos (mediante “métodos directos” “simulated annealing”, “charge flipping”, “método Rietveld”, etc) hasta que hay un ajuste óptimo entre el patrón de difracción calculado y el experimental localizando las posiciones correctas de cada uno de los átomos, distancias de enlace y ángulos. Para ello se utiliza programas cristalográficos especializados (SHELX, TOPAS, FullProf). Este método analítico se usa ampliamente en diferentes ramas de la ciencia (mineralogía, química, biología) y en la industria (farmacéutica) para el análisis de moléculas sencillas para entender sus propiedades y funcionalidad.

### Objetivos.

Familiarizar al alumno con los métodos de análisis de minerales o sustancias inorgánicas sencillas.  
Familiarizar al alumno con las técnicas de caracterización de difracción de rayos X en polvo y monocristal.  
Familiarizar al alumno con métodos de análisis de datos de difracción para la resolución de estructuras cristalinas.  
Familiarizar al alumno con análisis estadístico de datos.

### Resumen de los trabajos a realizar por el estudiante/Plan de trabajo.

Búsqueda bibliográfica

Caracterización de muestras minerales mediante espectroscopía de infrarrojos, análisis elemental, difracción de rayos X en polvo y monocristal.

Aprendizaje y manejo de software especializado de análisis de datos de difracción y de resolución de estructuras cristalinas.

Validación de resultados mediante métodos estadísticos usando software estadístico.

Discusión de resultados, escritura y defensa del trabajo de fin de Grado

Duración estimada: 3 meses. Fecha de inicio prevista: 15/10/2020.

---

***Una vez cumplimentado deberá ser enviado junto con el resto de propuestas del departamento en formato pdf al correo: [gradoquimica@ugr.es](mailto:gradoquimica@ugr.es). El nombre de cada fichero debe de coincidir con el código del TFG.***

---

### TIPOLOGÍA<sup>(2)</sup>

A. Trabajos de investigación con orientación básica o aplicada, cuya temática se relacione con los contenidos de la titulación, como:

- A1.** Estudio de casos, teóricos o prácticos, relacionados con la temática del Grado, a partir de material ya disponible en los Centros.
- A2.** Trabajos experimentales, de toma de datos de campo, de laboratorio, etc.
- A3.** Elaboración de guías prácticas relacionadas con la temática del Grado.

B. Trabajos científico-técnicos representativos del ejercicio profesional para el que capacita la titulación, como:

- B1.** Elaboración de un informe o un proyecto de naturaleza profesional.
- B2.** Elaboración de un plan de empresa.
- B3.** Simulación de encargos profesionales.

En ambas modalidades el TFG no podrá tener carácter exclusivamente bibliográfico, pero si podrá ser teórico, experimental, o combinación de éstos.