



## 1. DATOS BÁSICOS DEL TFG:

**Título:** Resolución y refinamiento de estructuras de minerales mediante difracción de rayos X de polvo (1)

**Descripción general** (resumen y metodología):

### 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.

### Metodología y 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: 15/10/2024.

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

### Objetivos planteados:

#### 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.

### Bibliografía básica:

#### Bibliografía

- Putnis A (1993). Introduction to Mineral Sciences. Cambridge University Press
- Rodriguez Gallego M. (1982). La difracción de los rayos X. Alhambra Universidad. Madrid.

### Recomendaciones y orientaciones para el estudiante:

#### Información al estudiante

Este TFG combina una parte experimental de preparación de muestras y uso de instrumentación científica (difractómetro de rayos X) y otra teórica de aprendizaje de software especializado para

tratamiento de datos.

**Plazas:** 1

**2. DATOS DEL TUTOR/A:**

**Nombre y apellidos:** ALEJANDRO RODRÍGUEZ NAVARRO

**Ámbito de conocimiento/Departamento:** CRISTALOGRAFÍA Y MINERALOGÍA

**Correo electrónico:** anava@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:**