



## 1. DATOS BÁSICOS DEL TFG:

**Título:** Análisis cuantitativo de fases minerales y refinamiento de estructuras mediante difracción de rayos X de polvo: Método de Rietveld.

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

La difracción de rayos X de polvo es una técnica de uso rutinario para la identificación y análisis semicuantitativo de muestras minerales. Sin embargo, para el análisis cuantitativo de fases minerales es necesario de una calibración previa con fases minerales puras. Alternativamente, se pueden cuantificar las fases minerales si se conoce su estructura utilizando el método de Rietveld. El método de Rietveld es un método matemático muy sofisticado que ajusta el patrón de DRX experimental con los calculados a partir de datos estructurales de las fases cristalinas presentes en la

muestra. De esta manera se puede determinar de forma cuantitativa el porcentaje de fases minerales y de los componentes amorfos de una muestra con una gran precisión y si necesidad de calibración previa. Asimismo, permite el ajuste de parámetros microestructurales (tamaño del cristalito), parámetros de celdilla y las posiciones de los átomos en la estructura. Este método analítico se usa ampliamente en la industria (minera, química, metalurgia, farmacéutica).

En este TFG se pretende que el alumno se familiarize con la técnica de difracción de rayos X y el método de Rietveld aplicado al análisis de la mineralogía y la estructura de muestras biominerales (conchas de moluscos, corales, algas coralinas) para determinar la influencia de diferentes parámetros ambientales (temperatura, pH, salinidad) en la composición mineral de estos materiales, su cristalinidad, sustituciones de iones (Mg, F, Na) en la estructura, etc.

El Trabajo Fin de Grado en Geología tiene 12 créditos ECTS. Equivalen a 300 horas de trabajo del estudiante que se reparten en las siguientes actividades:

- Actividades presenciales:
- Revisión bibliográfica: 20 horas
- Trabajo de campo:
- Trabajo de laboratorio: 180 horas
- Trabajo de gabinete:
- Elaboración de la memoria: 60 horas
- Preparación de defensa del TFG: 20 horas
- Otros: 20 horas

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

**Objetivos planteados:**

**Bibliografía básica:**

**Recomendaciones y orientaciones para el estudiante:**

**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:**