



FICHA DE CAPACIDADES Nº: 2

Persona de contacto para esta capacidad: JESUS ANGEL BLANCO RODRIGUEZ

1. TÍTULO (Debe servir para identificar la capacidad de I+D de forma clara, concisa y asequible para una persona no experta en la materia, intentando mostrar su aplicación. *Máx. 150 caracteres incluyendo espacios*)

ANÁLISIS Y CARACTERIZACIÓN ESTRUCTURAL DE FASES CRISTALINAS MEDIANTE EL MÉTODO DE RIETVELD

2. RESUMEN (Desarrollo del título incluyendo los aspectos más relevantes de dicha capacidad intentando captar el interés. *Máx. 500 caracteres incluyendo espacios*).

El análisis y caracterización estructural de fases cristalinas empleando el método de Rietveld nos permite obtener la máxima información contenida en un diagrama de difracción de polvo, a través del ajuste global de dicho difractograma. La información estructural resulta ser fundamental para la funcionalidad del material y es uno de los análisis básicos habitualmente realizados en este tipo de estudios. Es bien conocido que materiales cuya determinación estructural es incorrecta, o bien desconocida, son susceptibles de causar graves perjuicios.

3. DESCRIPCIÓN Y CARACTERÍSTICAS FUNDAMENTALES (Descripción de la capacidad asequible para no expertos, intentando dar respuesta a las siguientes preguntas: en qué consiste, cómo se lleva a cabo, qué ofrece, qué problemas resuelve. *Máx. 1500 caracteres*)

Nuestro grupo de investigación tiene experiencia de más de 25 años en el uso de técnicas de difracción de rayos x, neutrones y electrones (con distintas longitudes de onda) para la obtención de diagramas de difracción de muestras en polvo de alta resolución. Dichos difractogramas pueden ser modelados mediante el método de Rietveld y, así, poder extraer la información total contenida como, por ejemplo: la confirmación de las distintas fases cristalinas que pueden estar presentes en el material, el afinamiento de sus estructuras cristalinas, la determinación del porcentaje en masa, el análisis microestructural, cuantificación del material amorfo, etc.

Por lo tanto, el método de Rietveld es la herramienta más potente en el análisis de los diagramas de difracción de polvo pero, dada la complejidad de las ecuaciones de ajuste que gobiernan dicho modelo, es necesario disponer de una importante información previa como puede ser: una identificación previa de las distintas fases cristalinas presentes y/o una resolución estructural próxima a la presente. No obstante, el grupo de investigación dispone de elementos, tanto informáticos como conocimiento, necesarios para poder afrontar estas dificultades.

4. PALABRAS CLAVE (Máx. 10 palabras)



Difracción de polvo, método de Rietveld, fases cristalinas, Rayos X, radiación sincrotrón, neutrones.

4.1. Utilizar la clasificación de la Enterprise Europe Network BBS - Technology keywords. *A rellenar por el técnico OTRI*

2.2. Industrial Manufacture

2.7. Materials Technology

3.4. Chemical Technology and Engineering

5.2. Chemistry

5.3.1. Geology, Geological Engineering, Geotechnics

5.6.7. Solid state physics

6.1.16. Pharmaceutical Products/Drugs

5. APLICACIONES (*¿Para qué sirve? ¿Cuál es su utilidad? Máx. 750 caracteres incluyendo espacios*)

- Identificación de fases cristalinas ó mineralógicas.
- Afinamiento y/o determinación de la información estructural de cada una de estas fases.
- Conocer la proporción de fases cristalinas que pueden existir en una sustancia.
- Análisis microestructural: tamaños cristalinos, densidad de defectos, texturas, etc.
- Estimación de la cantidad de material amorfo.
- Control de la función y/o propiedades de los materiales sólidos.

6. VENTAJAS TÉCNICAS Y COMPETITIVAS (*Ventajas técnicas frente a otros productos/ servicios/ tecnologías y beneficios empresariales para un posible adquiriente. Máx. 750 caracteres incluyendo espacios*).

Técnica de análisis no destructiva que proporciona directamente la información relativa a la estructura cristalina, así como la composición y distribución de fases en una muestra de polvo.

Aunque otras técnicas, como la fluorescencia de rayos X o la espectrometría de masas, permiten establecer el porcentaje relativo de átomos, esta información no es determinante puesto que las propiedades físicas de los materiales se deben, no solo a su composición, sino fundamentalmente a su estructura. En este sentido, esta técnica complementa otras como la resonancia magnética nuclear y las espectroscopias cuyo enfoque es mucho más localizado. En definitiva, la difracción es una técnica muy potente al abarcar los principales aspectos en la caracterización estructural de los materiales.



7. SECTORES DE APLICACIÓN (Máx. 5 sectores)

Materiales (metales, plásticos, cementeras, loza).

7.1. Indicar los códigos empleando la clasificación de la EEN: BBS - Detailed Market Application Codes (VEIC). Máx. 5 sectores. **A rellenar por el técnico OTRI**

3.7. Analytical and Scientific Instrumentation

5.3. Other Medical/Health Related 2) Pharmaceuticals/fine chemicals

8.1. Chemicals and Materials

8. EMPRESAS CON LAS QUE COLABORA/ HA COLABORADO (Relacionadas con esta Capacidad de I+D. Máx. 10 empresas)

- Asturiana del Zinc
- Cementos Tudela-Veguín S.A.
- Instituto Nacional de Silicosis
- Hidroeléctrica del Cantábrico
- Fundación ITMA

8.1. Indicar el nombre de potenciales clientes. (Máx. 10 empresas)

- Duro Felguera
- Arcelor-Mittal
- Mecánicas

9. I+D ASOCIADA A ESTA CAPACIDAD (Indicar los resultados de I+D más destacados relacionados con esta capacidad: patentes, proyectos, contratos con empresas, creación de empresas spin-off)

9 Proyectos plan nacional de Materiales (1987 hasta 2011), 1 Proyecto Europeo, 6 Infraestructuras

10. EQUIPAMIENTO SINGULAR RELACIONADO CON ESTA CAPACIDAD

- Difractómetros de polvo de rayos X.
- Acceso a fuentes de haces de neutrones y radiación sincrotrón.

11. FOTOGRAFÍAS/ ESQUEMAS/ DIBUJOS (Adjuntar 1 ó 2 fotos, esquemas, dibujos en formato *gif* o *jpeg*, no sujetos a derechos de terceros, que acompañen a la descripción de la capacidad. No insertar en el documento Word. Tamaño máx: 512 x 500 píxeles)



Fig. 4 Difractómetros de polvo.

12. COMENTARIOS (Incluir aquella información y comentarios que estime oportuno)
