

Tecnologías Emergentes

Materiales del futuro

Autores: D. Luis Miguel Requejo Morcillo, OT MAT, SDG PLATIN.

Palabras clave: materiales, IA, multiescala, jerárquico, arquitectónico.

Líneas I+D+i ETID relacionadas: 3.2.1, 3.2.2, 9.1.1.

Introducción

Para los ingenieros y científicos dedicados al desarrollo de nuevos materiales, el principal objetivo es la mejora continua de sus propiedades (pesos, prestaciones mecánicas, propiedades físicas, químicas, etc.), pero también hay que considerar otros de especial interés como son la multifuncionalidad, la procesabilidad o el coste, por ejemplo, de cara a conseguir

productos de gran calidad a disposición de los usuarios finales.

Uno de los usuarios más exigentes, en cuanto a lo que prestaciones de materiales se refiere, son las Fuerzas Armadas, por su necesidad de incorporar en los sistemas militares tecnologías punteras lo que obedece, en muchos casos, a la búsqueda de una ventaja cualitativa y a la capacidad de disuasión sobre el potencial adversario.

Aunque el margen de mejora de las prestaciones de los materiales considerados como convencionales puede parecer pequeño, la comunidad científica y tecnológica de este sector ha recurrido durante los últimos tiempos a nuevos conceptos y estrategias para lograr saltos cualitativos importantes. Algunos son los materiales arquitectónicos, los jerárquicos, las herramientas de simulación multiescala

o las técnicas de aprendizaje automático, que supondrán un avance muy significativo en la ciencia e ingeniería de materiales para lograr los objetivos comentados anteriormente. Este artículo tratará de aclarar qué son estos conceptos y cómo se aplican dentro del ámbito del desarrollo de nuevos materiales.

El aprendizaje automático

La digitalización y la virtualización también son cada vez más importantes en la ciencia de los materiales: la investigación, el desarrollo y la producción de nuevos materiales dependen cada vez más de la disponibilidad de herramientas de simulación y de aprendizaje automático en el que la inteligencia artificial (IA) adquiere y aplica de forma autónoma nuevos conocimientos, pudiendo permitir a los investigadores desarrollar materiales

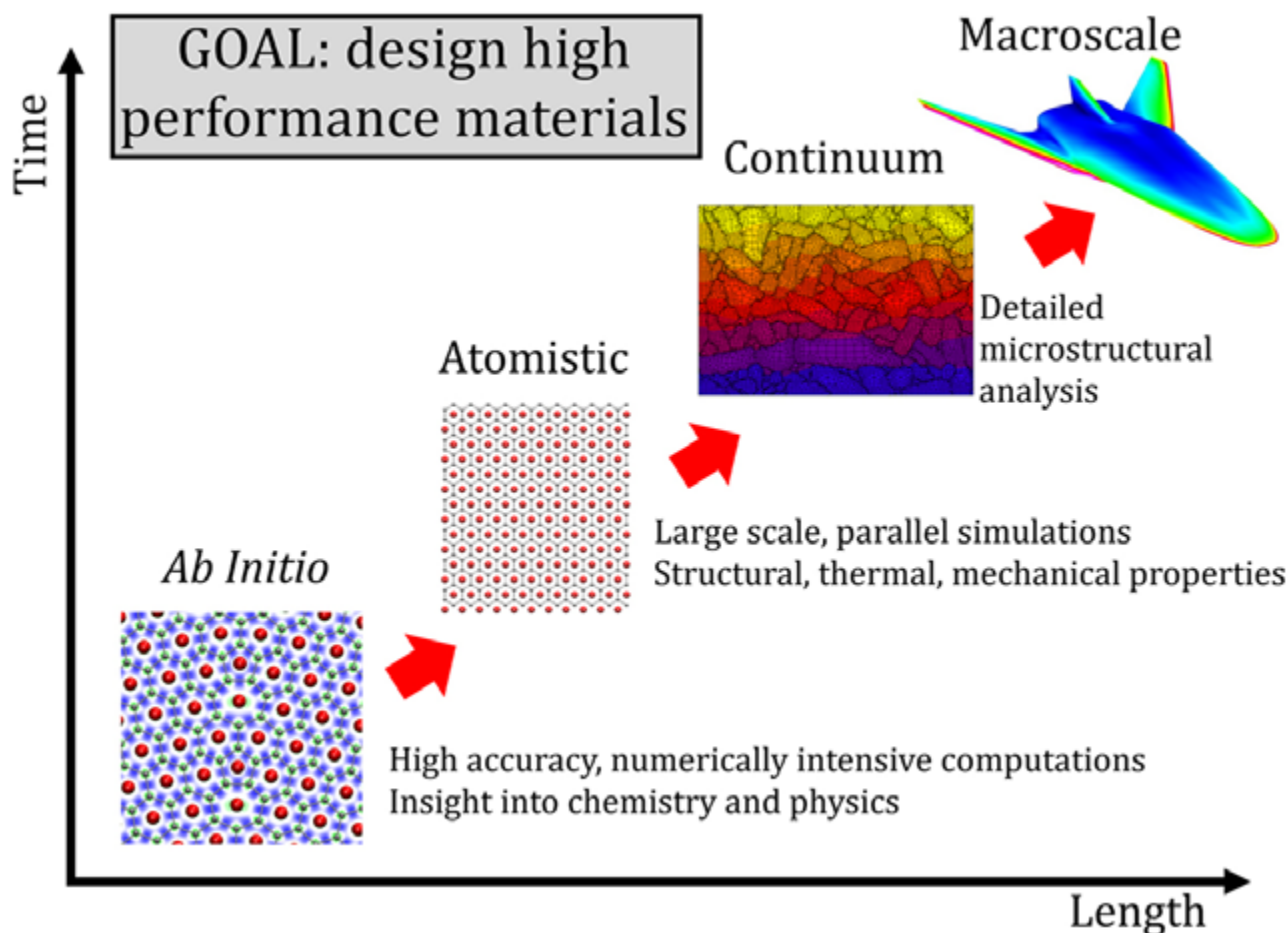


Grafico representativo del modelado multiescala. La química de un material se puede probar con la mecánica cuántica; sus propiedades térmicas y mecánicas, con técnicas atomísticas; y sus propiedades a micro y macroescala, con métodos continuos. El salto de un nivel a otro puede generar un poderoso modelo predictivo. (Fuente: John Lawson, Alexander Thompson, www.nas.nasa.gov)

en un entorno puramente virtual. La IA y los métodos de aprendizaje automático específicamente adaptados a las simulaciones de materiales permiten lograr una importante ventaja de velocidad, en comparación con los métodos de simulación convencionales basados en cálculos clásicos o de mecánica cuántica. Esto redundaría en la capacidad de desarrollar sistemas de materiales más grandes y complejos en un entorno puramente virtual, y comprenderlos y optimizarlos hasta el nivel atómico.

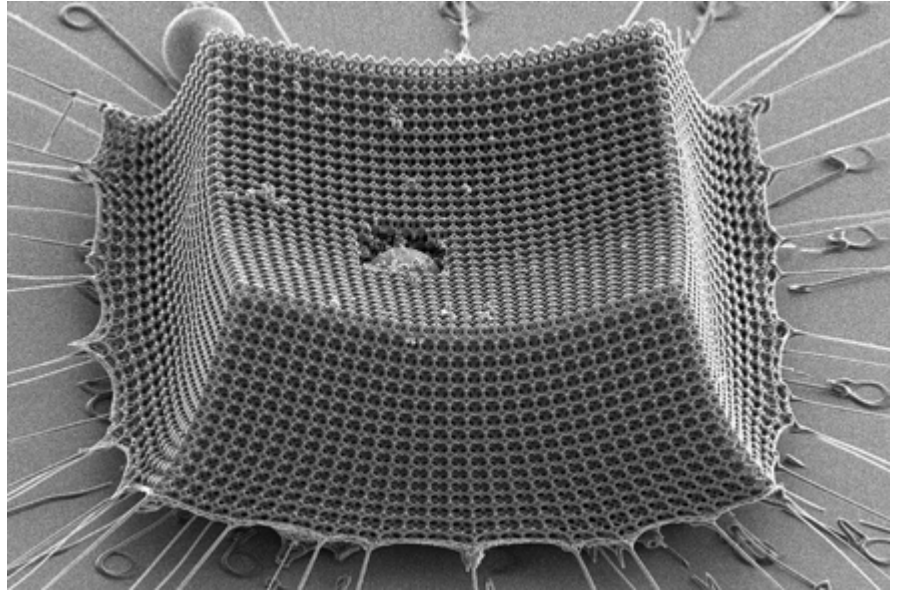
En los principios básicos del aprendizaje automático, utilizado para las simulaciones en la ciencia de los materiales, hay que incluir el proceso de adquisición de datos y los métodos de aprendizaje activo. Los algoritmos de aprendizaje automático no solo permiten a la inteligencia artificial procesar los datos de entrada, sino también encontrar patrones y correlaciones en grandes conjuntos de datos, aprender de ellos, y hacer predicciones y decisiones autónomas.

En cualquier caso, para ampliar las posibilidades de las simulaciones de materiales en el futuro, los expertos en la materia sugieren el desarrollo de métodos híbridos que combinan métodos convencionales y de aprendizaje automático.

El análisis multiescala

Normalmente, en la definición de las prestaciones de los productos futuros se establecen requisitos que superan las capacidades de los materiales que están inmediatamente disponibles. Componentes cada vez más pequeños y ligeros, mejores propiedades mecánicas o mayor número de funcionalidades, entre otros. En definitiva, los científicos e ingenieros deben encontrar soluciones cada vez más complicadas.

Este desafío se extiende más allá de saber elegir qué material o combinación de materiales se podría usar, de sus estructuras o de cómo se fabrica una pieza terminada. Para optimizar su diseño, aprovechar realmente los beneficios que ofrecen los materiales avanzados y entender las relaciones entre su estructura y sus propiedades, se debe adoptar un enfoque «multiescala». Esto consiste en considerar cómo las diferentes escalas de longitud (es decir, desde macroscópicas a microscópicas y nanoscópicas) y las diversas estructuras contribuyen a las propiedades de los productos finales.



Este material arquitectónico, más delgado que un cabello humano, puede absorber los impactos de micropartículas que viajan a velocidades supersónicas. (Fuente: www.caltech.edu)

El comportamiento de los materiales es el resultado de fenómenos fisicoquímicos que ocurren a diferentes escalas. Para entenderlo, es necesario aplicar la técnica de análisis adecuada a la escala en que se origina el comportamiento que se quiere estudiar, hasta llegar a la escala ingenieril, que es en la que se sitúan las piezas, aparatos y sistemas que se pretenden diseñar. Dependiendo de la escala, cada técnica de simulación aporta diferente información de utilidad. Las simulaciones a escala básica ayudan a comprender el origen del comportamiento del material, analizar efectos de refuerzos, aditivos, etc. Conforme se incrementa la escala, la simulación permite evaluar cómo se van acumulando efectos y se va perfilando el comportamiento del material.

Las simulaciones para el diseño de materiales multiescala son un ámbito científico en rápido crecimiento. Con el aumento de la capacidad de procesamiento de los ordenadores y los métodos numéricos cada vez más especializados, se pueden lograr muy buenas simulaciones de la mecánica de los materiales. Lamentablemente, no existe una fórmula única que pueda describir estos cambios a medida que avanzamos de la subatómica a la macroescala, pero existen herramientas que permiten analizar más rápidamente diferentes combinaciones de materiales y estructuras para optimizar el rendimiento del producto final.

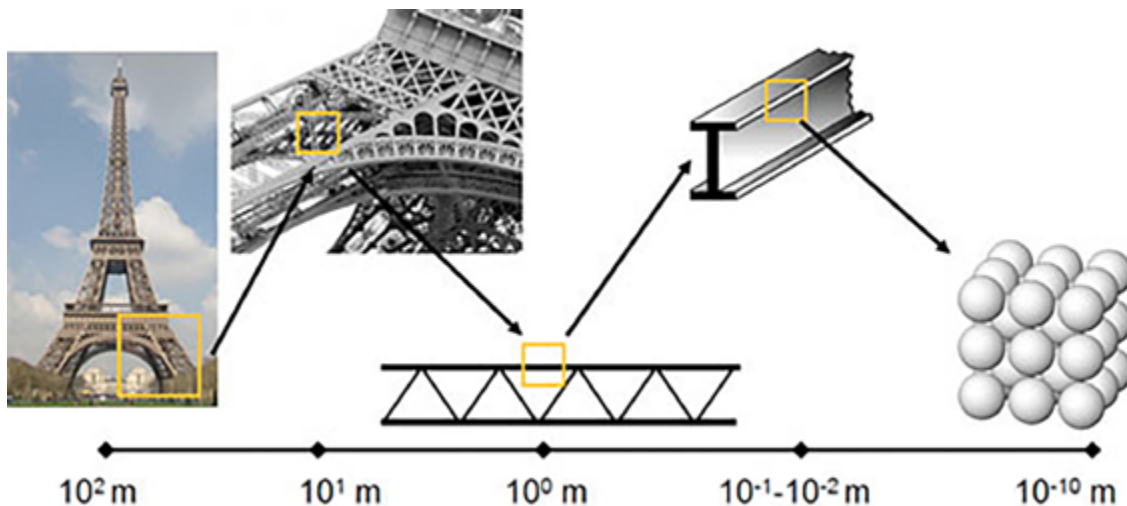
El análisis multiescala permite diseñar con más libertad, permitiendo realizar cambios en los productos en función de múltiples variables y explorar activamente nuevas áreas de investigación de vanguardia y metodologías de materiales que incluyen nanomateriales, materiales arquitectónicos, jerárquicos o los inteligentes, entre otros. Por tanto, los beneficios del modelado y simulación de materiales multiescala mejoran de manera integral la productividad en I + D.

Materiales arquitectónicos

Los materiales arquitectónicos son materiales multifásicos y/o celulares en los que la distribución de las fases se controla y optimiza cuidadosamente para lograr funcionalidades o propiedades específicas. Estos materiales pueden considerarse como un medio homogéneo en el que las propiedades son función de la forma en que la materia está dispuesta en la celda unitaria y de las del material constituyente.

En un principio, la investigación en este campo ha dado como resultado la identificación de una serie de estructuras topológicamente simples, fáciles de fabricar y estables (tipo *honeycombs*), que se han optimizado para obtener una rigidez y resistencia específicas, protección frente a impactos y explosiones, absorción acústica, dispersión de ondas, disipación del calor y combinaciones de todas estas propiedades.

Tecnologías emergentes



Estructura jerárquica de la Torre Eiffel. Tiene más de 300 metros de altura, con una base cuadrada de 100 metros por lado. La estructura más grande está compuesta por una celosía donde vigas diagonales con dimensiones del orden de decenas de metros conectan elementos entre sí. Cada viga individual tiene dimensiones de sección transversal de centímetros, compuestas de un material de hierro con una estructura atómica de átomos de hierro, carbono, silicio y manganeso en una estructura de celosía en la escala Angstrom (10^{-10} metros). (Fuente: Laboratorio de Mecánica y Biología Ósea, Universidad de Indiana-Universidad de Purdue en Indianápolis)

En los últimos años, los grandes avances en las técnicas de fabricación (fundamentalmente las tecnologías de fabricación aditiva) y el desarrollo de las nuevas herramientas de modelado multifásicas, y multiescala e IA, han permitido la obtención de nuevos materiales arquitectónicos con geometrías más complejas y un control más preciso sobre la distribución de las fases sólidas y los huecos, desde la escala nanométrica hasta la macro-métrica. El resultado son materiales celulares con propiedades como la densidad, rigidez, resistencia, absorción de energía, permeabilidad o reactividad química, no alcanzadas anteriormente. Además, existe la multifuncionalidad, que promete avances importantes en áreas tecnológicas como, por ejemplo, en el caso de los recubrimientos funcionales.

Algunas de las líneas de investigación más interesantes en este campo son la exploración de los efectos del tamaño en el desarrollo de materiales nanoestructurados para la obtención de mejores propiedades, la investigación de celdas unitarias geométricamente complejas con respuestas mecánicas más eficientes, métodos de fabricación novedosos con mayor resolución y escalabilidad, y el desarrollo de herramientas de optimización de diseño mejoradas.

Materiales jerárquicos

Los materiales jerárquicos son materiales organizados en estructuras de

múltiples tamaños; es decir, contienen elementos estructurales que, a su vez, tienen estructura. El orden jerárquico de una estructura o de un material puede definirse como el número n de niveles de escala con estructura reconocida. Por ejemplo, un sólido que se componga de varias capas de distinto grosor, o que tenga cavidades tubulares y concéntricas ocupadas por átomos, se puede considerar una estructura jerárquica. Esta jerarquía estructural puede desempeñar un papel importante en la determinación de las propiedades del material a nivel de producto.

La comprensión de los efectos de la estructura jerárquica puede orientar la síntesis de nuevos materiales con propiedades físicas que se adaptan a aplicaciones específicas. Estos materiales son materiales extremos y se puede, por ejemplo, lograr una relación resistencia/peso extremadamente grande. El desarrollo de este tipo de materiales es un tema interdisciplinario que incluye conceptos de ciencia de los materiales, química, nanotecnología e incluso la biotecnología, debido a su naturaleza bioinspirada. La naturaleza utiliza una jerarquía de escalas de tamaño y unas estructuras escalonadas para construir materiales ligeros y resistentes desde un punto de vista mecánico.

Estos materiales se utilizan en aplicaciones como la protección, infraestructuras,

monitorización de la salud estructural y autorreparación.

Conclusiones

El modelado y la simulación están transformando la ciencia de los materiales, hasta tal punto que se ha convertido en una herramienta indispensable para acelerar y optimizar el descubrimiento de nuevos materiales que cubran los requisitos cada vez más exigentes en cuanto a prestaciones y multifuncionalidad que los futuros sistemas de defensa necesitan.

Nuevos materiales, como los denominados arquitectónicos o los jerárquicos, han despertado un enorme interés porque muestran comportamientos nuevos y personalizados mediante la interacción entre las propiedades del material y la geometría.

Durante los próximos años, se espera un gran progreso en la optimización de las propiedades mecánicas y multifuncionales. Paralelamente, también se contemplan progresos en la mejora de las herramientas de simulación y aprendizaje automático ya que, a día de hoy, no se tiene constancia de la existencia de un algoritmo o herramienta que brinde la capacidad de diseño de materiales y estructuras con comportamientos no lineales, sin olvidar las técnicas de fabricación escalables que permiten la producción rápida de materiales a gran escala con características controladas a micro y nanoescala.