

institute
imdea
materials

**IMDEA Materiales: Diseño,
procesado, caracterización
y simulación de materiales
avanzados**

**IMDEA Materials: Design,
processing, characterisation and
simulation of advanced materials**

15 años de IMDEA Materiales

IMDEA Materiales ha sido desde su creación un organismo vivo, que más allá de desarrollar una serie de líneas de investigación establecidas al comienzo de su andadura, ha sido capaz de incorporar nuevos objetivos y programas, posicionándolo como centro de referencia internacional

Escribir esta introducción al número especial dedicado a nuestro 15 aniversario no es tarea fácil cuando aún estamos recuperándonos de dos años de pandemia y al comienzo de una invasión violenta por parte de Rusia en Ucrania, que está generando una catástrofe humanitaria y económica sin precedentes en nuestra historia reciente. Pero 15 años es un aniversario significativo y tenemos que celebrar nuestros logros.

[IMDEA Materiales](#) empezó su vida hace quince años, prácticamente de la nada, con tres personas y unos precarios espacios para ser utilizados como laboratorios y despachos. Quince años después, somos casi 150 personas, y tenemos una moderna sede con más de 7.600 m², de los cuales casi 3.000 son de laboratorios. En el camino hemos desarrollado más de 210 proyectos de investigación de los cuales 120 son competitivos y 90 vinculados a I+D empresarial, hemos publicado más de 1.200 papers, supervisado 76 tesis doctorales y generado 19 patentes (3 licenciadas) y 4 registros de software (3 licenciados). Pero quiero centrarme en algunos hitos que considero importantes.

Posiblemente el primero de ellos fuera el traslado a nuestra sede en Getafe. La mudanza al moderno edificio que ahora ocupamos nos dio la sensación de que el proyecto era un proyecto vigoroso y real y nos convenció de lo que podríamos llegar a ser hoy: un Instituto de referencia internacional en Ciencia e Ingeniería de Materiales. Desde el principio de nuestra actividad, nos planteamos muy en serio cumplir con los tres pilares sobre los que se estableció nuestra misión fundacional: hacer ciencia de excelencia, que esa ciencia fuera una ciencia orientada a cumplir los grandes objetivos de la sociedad que nos rodea y atraer talento. El cumplimiento del primer pilar, ha culminado con el segundo hito que quiero destacar: la consecución del sello María de Maeztu por parte de la [Agencia Estatal de Investigación \(AEI\)](#) en el año 2019. IMDEA Materiales ha sido desde su creación un organismo vivo, que más allá de desarrollar una serie de líneas de investigación establecidas al comienzo de nuestra andadura, hemos sido capaces de incorporar nuevos objetivos y programas, que han tenido un papel importante en nuestra corta vida. Como incidir en el desarrollo de materiales para el almacenamiento de energía, o en la caracterización multiescala que, a su vez, ha permitido potenciar nuestras fortalezas en modelización y simulación. Sin olvidar nuestro eje central, los materiales estructurales avanzados (metales, polímeros, compuestos, materiales base carbono y silicio) que



José Manuel Torralba
Director de IMDEA Materiales
Director of IMDEA Materials

15 years of IMDEA Materials

Since its creation, IMDEA Materials has been a living organism, and beyond developing a series of research lines established at the beginning of our existence, we have been able to incorporate new objectives and programmes that position us as an international reference centre

Writing this introduction to the special issue dedicated to our 15th anniversary is no easy task when we are still recovering from two years of pandemic and the beginning of a violent invasion by Russia in Ukraine, which is generating a humanitarian and economic catastrophe unprecedented in our recent history. But 15 years is a significant anniversary and we have to celebrate our achievements.

[IMDEA Materials](#) started its life fifteen years ago, practically from scratch, with three people and a few precarious spaces to be used as laboratories and offices. Fifteen years later, we are almost 150 people, and we have a modern headquarters with more than 7,600 m², of which almost 3,000 are laboratories. Along the way, we have developed more than 210 research projects, 120 of which are competitive and 90 linked to R&D with industry, we have published more than 1,200 papers, supervised 76 doctoral theses and generated 19 patents (3 licensed) and 4 software registrations (3 licensed). But I would like to focus on some milestones that I consider important.

Possibly the first of these was the move to our headquarters in Getafe. The move to the modern building we now occupy gave us the feeling that the project was a vigorous and real project and convinced us of what we could become today: an Institute of international reference in Materials Science and Engineering. From the very beginning of our activity, we were very serious about fulfilling the three pillars on which our founding mission was established: to do science of excellence, for that science to be oriented towards meeting the major objectives of the society around us, and to attract talent. The fulfilment of the first pillar has culminated in the second milestone that I would like to highlight: the achievement of the María de Maeztu seal by the [National Research Agency \(AEI\)](#) in 2019. Since its creation, IMDEA Materials has been a living organism, and beyond developing a series of research lines established at the beginning of our existence, we have been able to incorporate new objectives and programmes, which have played an important role in our short life. Such as the development of materials for energy storage, or multi-scale characterisation which, in turn, has allowed us to enhance our strengths in modelling and simulation. Without forgetting our core, the advanced structural materials (metals, composites, polymers, carbon and silicon-based materials), which at IMDEA Materials have achieved a multifunctional

en IMDEA Materiales alcanzan un carácter multifuncional permitiéndoles cubrir capacidades mucho más allá de la mera resistencia mecánica (resistencia al fuego, a las altas temperaturas, bajas resistividades, capacidad de almacenar energía,...). Y recientemente, gracias a la financiación conseguida con el sello María de Maeztu, materiales para la salud. Esta flexibilidad nos ha permitido ir posicionándonos como centro de referencia internacional, pese a nuestra juventud.

Otro importante valor a reseñar en nuestra corta historia, ha sido nuestro empeño, desde el primer día, en establecer relaciones estratégicas con importantes empresas (no solo en España) que lideran sectores de interés y vinculados con los objetivos, en términos de I+D, del Instituto. Hoy podemos contar con la confianza de algunas empresas con las que, en su día, empezamos a trabajar ofreciendo más futuro que presente, pero que gracias a una buena y eficiente colaboración, hoy son socios estratégicos. El portfolio de empresas colaboradoras de IMDEA Materiales ha ido creciendo de manera constante y hoy cubre tres continentes (Europa, Asia y Norteamé-

character, allowing them to cover capacities far beyond mere mechanical properties (fire resistance, high temperatures, low resistivities, capacity to store energy, etc.). And recently, thanks to the funding obtained with the María de Maeztu seal, materials for health. This flexibility has allowed us to position ourselves as an international reference centre, despite our youth.

Another important value to highlight in our short history has been our determination, from the very first day, to establish strategic relationships with important companies (not only in Spain) that are leaders in sectors of interest and linked to the Institute's R&D objectives. Today we can count on the trust of some companies with which, at the time, we began to work offering more future than present, but which, thanks to good and efficient collaboration, are now strategic partners. IMDEA Materials' portfolio of collaborating companies has grown steadily and now covers three continents (Europe, Asia and North America). Linked to this pillar of our activity, oriented research and transfer, I would like to high-



rica). Vinculado a este pilar de nuestra actividad, la investigación orientada y la transferencia, quiero reseñar otro importante hito en nuestra corta vida: el lanzamiento de nuestra primera spin-off, en el año 2021. [FLOATECH](#) es fruto de un largo empeño de nuestro investigador principal Juan José Vilatela (que además ostenta el privilegio de ser uno de los pocos investigadores que puede presumir de haber conseguido tres ERC's grants).

Y en el capítulo de los logros, no quiero dejar de mencionar nuestra contribución a la atracción de talento a nuestra región. Es consecuencia del tercer pilar de nuestra misión, y hoy podemos afirmar que el conjunto de los siete Institutos IMDEA es el instrumento de atracción de talento científico internacional más importante de la Comunidad de Madrid. Hoy, en IMDEA Materiales hay un 55% de investigadores no españoles, situándonos en, posiblemente, el porcentaje más alto de España. Por nuestro Instituto han pasado 302 investigadores (de los cuales 174 no eran españoles) que hoy se encuentran desarrollando tareas de investigación e innovación en centros de investigación y universidades, y también en empresas de todo el mundo. La transferencia no solo se realiza con publicaciones y resultados de investigación. La mejor transferencia es la que se inserta en la sociedad a través del conocimiento que se llevan consigo las personas que han crecido profesionalmente en nuestro Instituto.

Pero en un aniversario como este, no solo hay que hablar de logros. Es de justicia también hablar de agradecimientos. A la *Comunidad de Madrid*, que ideó el proyecto IMDEA y lo impulsó con financiación desde el principio. A los directores que me han precedido, los profesores Javier Llorca e Ignacio Romero. Javier puso en marcha y sentó las bases de lo que hoy es el Instituto e Ignacio afianzó y consolidó el trabajo de Javier. Covadonga Rosado, nuestra gerente, permitió resolver, desde el primer día, los innumerables problemas que se pusieron en nuestro camino. Nuestra oficina de proyectos, de transferencia, administración y nuestros técnicos han hecho posible que la vida de los investigadores sea mucho más fácil y hayan podido dedicar mucho más tiempo a la investigación. Gratitud hacia nuestro patronato, siempre apoyando nuestras decisiones e impulsando nuestro crecimiento. Nuestro consejo científico internacional, guiándonos hacia nuevos mundos en el universo de los materiales, evaluándonos, criticándonos cuando correspondía, ayudándonos en la selección de personas. Nuestro entorno académico en la comunidad de Madrid (universidades públicas, OPIS estatales), en el que estamos integrados y con los que colaboramos estrechamente. Y sobre todo, al inmenso talento investigador con el que hemos contado desde el principio. Talento de todas las partes del mundo. Talento que nos ha permitido ser competitivos, excelentes. Talento que es el combustible de esta nave que se llama IMDEA Materiales.

light another important milestone in our short life: the launch of our first spin-off, in 2021. [FLOATECH](#) is the result of a long effort by our principal investigator Juan José Vilatela (who also has the privilege of being one of the few researchers who can boast of having obtained three ERC grants).

And in the chapter on achievements, I would like to mention our contribution to attracting talent to our region. This is a consequence of the third pillar of our mission, and today we can affirm that the seven IMDEA Institutes as a whole are the most important instrument for attracting international scientific talent to the region of Madrid. Today, at IMDEA Materials there are 55% non-Spanish researchers, possibly the highest percentage in Spain. Our Institute has had 302 researchers (174 of whom were non-Spanish) who are today carrying out research and innovation tasks in top research centres and universities, as well as in companies all over the world. Transfer does not only take place through publications and research results. The best transfer is the one that is inserted in society through the knowledge that the people who have grown professionally in our Institute take with them.

But on an anniversary like this, we don't just have to talk about achievements. It is also fair to speak of thanks. To the *Comunidad de Madrid*, which devised the IMDEA project and promoted it with funding from the beginning. To the directors who have preceded me, Professors Javier Llorca and Ignacio Romero. Javier set up and laid the foundations of what is now the Institute, and Ignacio strengthened and consolidated Javier's work. Covadonga Rosado, our manager, allowed us to solve, from the first day, the innumerable problems that came our way. Our projects and transfer offices, administration and our technicians have made the life of the researchers much easier and they have been able to dedicate much more time to research. Gratitude to our Board of Trustees, always supporting our decisions and driving our growth. Our international Scientific Council, guiding us towards new worlds in the universe of materials, evaluating us, criticising us when appropriate, helping us in the selection of people. Our academic environment in the region of Madrid (public universities, national research centres), in which we are integrated and with which we collaborate closely. And above all, the immense research talent we have had from the beginning. Talent from all over the world. Talent that has allowed us to be competitive and excellent. Talent that is the fuel of this ship called IMDEA Materials.



Contribuimos a la transición hacia la movilidad eléctrica impulsando nuevos materiales, procesos de fabricación sostenibles y arquitecturas multifuncionales para la nueva generación de baterías

We contribute to the transition to electric mobility by developing new materials, sustainable manufacturing processes and multifunctional architectures for the new generation of batteries

Conforme crece nuestro equipo multidisciplinar de investigadores en el área de materiales para energía, aumentan las áreas de aplicación de las herramientas y el conocimiento que generamos

Autor.- Juan José Vilatela, Investigador Senior, Responsable del grupo de Nanocompuestos Multifuncionales en IMDEA Materiales.

La revolución digital de las últimas dos décadas fue posible gracias al desarrollo de las baterías de ion litio. Permitieron pasar de móviles pesados como ladrillos a dispositivos inteligentes miniaturizados. Las baterías están de nuevo en el centro de una revolución: la transición energética. Se estima que las baterías son responsables del 30% de las reducciones de emisiones de gases invernadero conseguidas en Europa. Son imprescindible para lograr reducciones en algunas de las actividades humanas más contaminantes, la movilidad y el uso de energía para confort térmico. Están acelerando el cambio hacia modos nuevos de movilidad más sostenibles. Para el año 2025 se estima que habrá 30 millones vehículos eléctricos circulando en el mundo.

La electrificación de la Unión Europea es vista como una oportunidad para llevar a cabo una gran transición hacia la sostenibilidad y la independencia energética respecto a otras regiones. Generar una industria propia para la fabricación de baterías en Europa es una labor titánica, llena de apasionantes retos técnicos. La estrategia de IMDEA Materiales en este ámbito se centra en investigaciones encaminadas

As our multidisciplinary team of researchers in the area of materials for energy grows, so do the application areas of the tools and knowledge we generate

Author.- Juan José Vilatela, Senior Researcher, Head of Multifunctional Nanocomposites Group at IMDEA Materials.

The digital revolution of the last two decades was made possible by the development of lithium-ion batteries. They made it possible to move from heavy, brick-like mobiles to miniaturised smart devices. Batteries are again at the centre of a revolution: the energy transition. Batteries are estimated to be responsible for 30% of the greenhouse gas emission reductions achieved in Europe. They are essential for achieving reductions in some of the most polluting human activities: mobility and the use of energy for thermal comfort. They are accelerating the shift towards new, more sustainable modes of mobility. By 2025, it is estimated that there will be 30 million electric vehicles on the road worldwide.

The electrification of the European Union is seen as an opportunity to make a major transition towards sustainability and energy independence from other regions. Building Europe's own battery manufacturing industry is a titanic task, full of exciting technical challenges. IMDEA Materials' strategy in this area focuses on research into the new generation of batteries, using new materials,

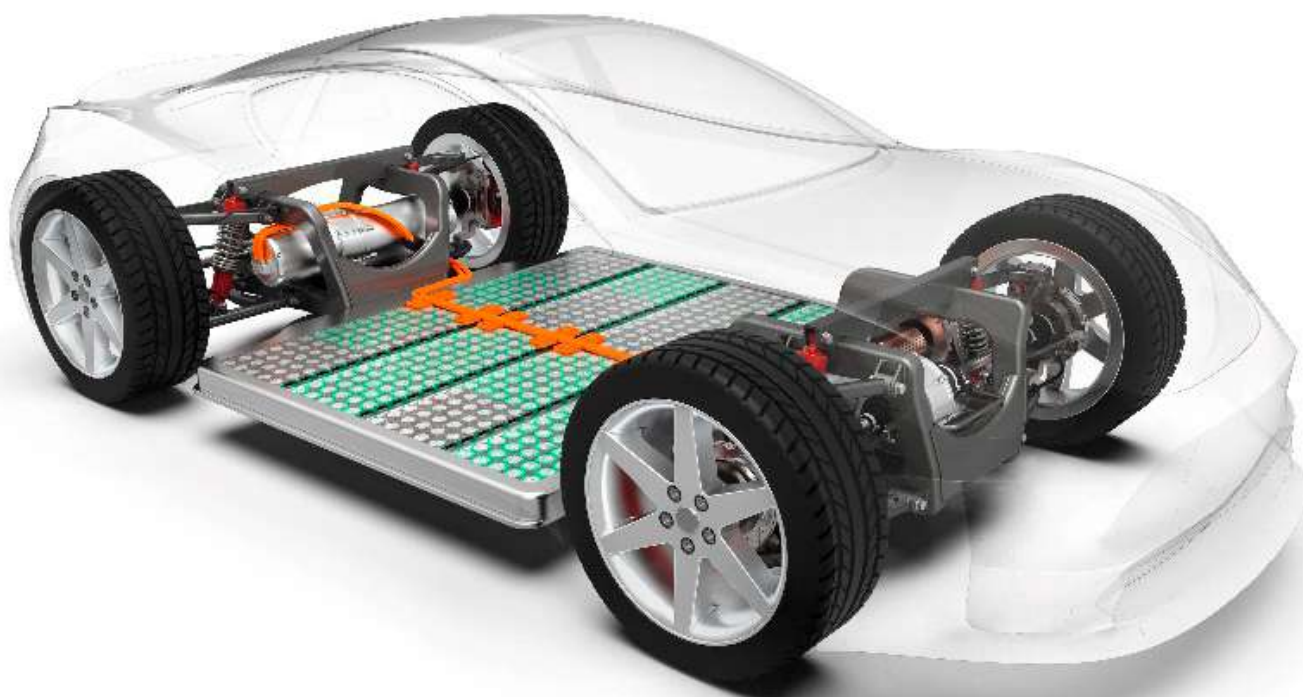


Figura 1. Concepto de coche eléctrico.

Figure 1. Electric car concept.

a las nuevas generaciones de baterías mediante nuevos materiales, procesos de fabricación sostenibles y arquitecturas multifuncionales.

Utilizamos herramientas informáticas y procesos singulares para sintetizar nuevos materiales activos con mayor capacidad de almacenamiento y transferencia de energía que los actuales. Estos van desde ánodos nanoestructurados, hasta cátodos libres de elementos críticos, pasando por electrolitos retardantes de fuego que aumentan la seguridad de operación.

Dentro de los procesos de fabricación, es notable nuestro proceso para fabricar ánodos de silicio de última generación con un proceso

sustainable manufacturing processes and multifunctional architectures.

We use computational tools and unique processes to synthesise new active materials with higher energy storage capacity and power than current ones. These range from nanostructured anodes, to critical element-free cathodes, to fire-retardant electrolytes that increase operational safety.

Within manufacturing processes, we highlight our process for making next-generation silicon anodes with a dry process, by assembling nanowires suspended in a gas. In addition to elimi-

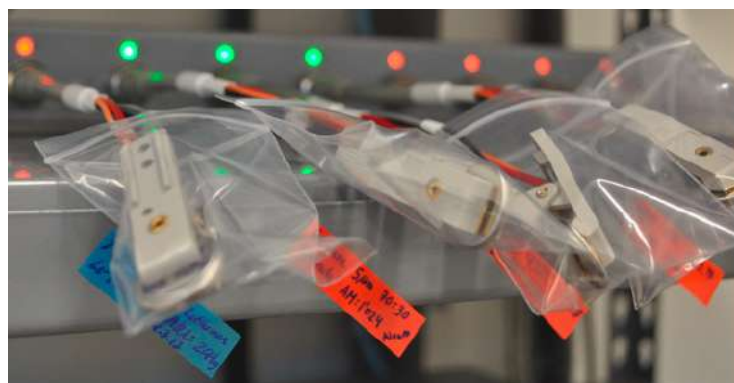


Figura 2. Ciclado de baterías y ensayo de resistencia al fuego.



Figure 2. Battery cycling and fire resistance test.

seco, mediante en ensamblado de nanohilos suspendidos en un gas [1]. Además de eliminar el uso de disolventes, tiene potencial de reducir en un 25% el consumo energético en el ensamblado de baterías, equivalente a evitar la emisión de alrededor de 2 toneladas de CO_2 por vehículo eléctrico.

IMDEA Materiales lleva también más de un lustro desarrollando nuevas arquitecturas de baterías multifuncionales capaces de soportar

nating the use of solvents, it has the potential to reduce energy consumption in battery assembly by 25%, equivalent to avoiding the emission of around 2 tonnes of CO_2 per electric vehicle.

Over more than five years, IMDEA Materials has also been developing new multifunctional battery architectures capable of withstanding mechanical deformation. Together with industrial partners from the automotive and aviation sectors, IMDEA Energy and other collaborators, we have demonstrated flexible, thermo-

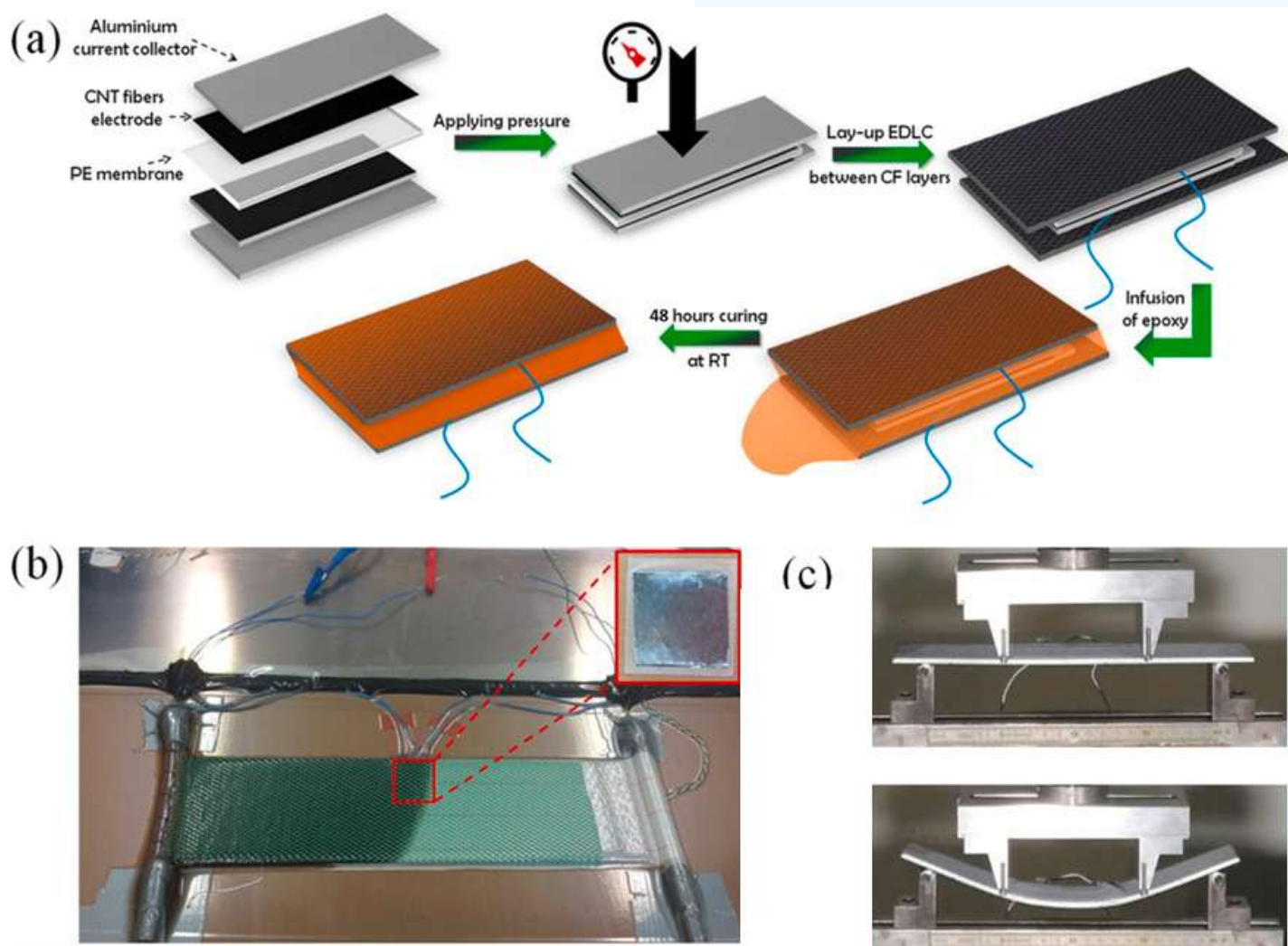


Figura 3. (a) Esquema de la fabricación de un supercondensador estructural mediante el estampado de una lámina intermedia de un supercondensador de doble capa eléctrica (EDLC) basado en fibras nanotubos de carbono (CNT), su incrustación entre las capas de fibras de carbono (CF) y la infusión/curado de resina epoxi. (b) Fotografías de un laminado de CF/EDLC/CF durante la infusión de resina epoxi y de la hoja intermedia de 4 cm² de EDLC incrustada en él (inset). (c) Ensayo de flexión del material final. Proyecto SORCERER [3]

Figure 3. (a) Scheme of the fabrication of structural supercapacitor composite by stamping a CNT fiber-based EDLC interleaf, embedding it between CF plies and infusion/curing of epoxy resin. (b) Photographs of a CF/EDLC/CF lay-up during epoxy infusion and of the 4 cm² EDLC interleaf embedded in it (inset). (c) Flexural test of the final material. SORCERER Project [3]

deformaciones mecánicas. Junto con socios industriales del sector automoción y aviación, IMDEA Energía y otros colaboradores, hemos demostrado baterías flexibles, termoconformables y hasta componentes estructurales con capacidad de almacenamiento de energía [2].

Conforme crece nuestro equipo multidisciplinar de investigadores en el área de materiales para energía, aumentan las áreas de aplicación de las herramientas y el conocimiento que generamos. Además de baterías más allá de las de ion litio, nuestros investigadores desarrollan *in-silico* nuevos catalizadores con mayor eficiencia para producir vectores energéticos estratégicos [4].

[1] M. Rana, A. Pendashteh, R. S. Schäuferle, J. Gispert, J.J. Vilatela. - Eliminating Solvents and Polymers in High-Performance Si Anodes by Gas-Phase Assembly of Nanowire Fabrics, *Advanced Energy Materials*, 2022, DOI: [10.1002/aenm.202103469](https://doi.org/10.1002/aenm.202103469)

[2] N. Boaretto, B. Dávila, S. Sevilla, G. García, A. Mikhanchan, M. Rana, A. Yusuf, L. Ubierna Martínez, M. Castillo García, J. Palma, D.-Y. Wang, R. Marcilla, J.J. Vilatela. - Thermoconformable, Flexible Lithium-Ion Batteries. - *Advanced Materials Technologies*, 2022, DOI: [10.1002/admt.202101635](https://doi.org/10.1002/admt.202101635)

[3] E. Senokos, Y. Ou, J.J. Torres, F. Sket, C. González, R. Marcilla, J.J. Vilatela. - Energy storage in structural composites by introducing CNT fiber/polymer electrolyte interleaves. *Scientific Reports* 8, 3407, 2018. DOI: [10.1038/s41598-018-21829-5](https://doi.org/10.1038/s41598-018-21829-5)

[4] C. Martínez-Alonso, J. M. Guevara-Vela, J. Llorca. - Understanding the effect of mechanical strains on the catalytic activity of transition metals. *physical chemistry chemical physics* 8, 24, 4832-4842, 2022. DOI: [10.1039/D1CP05436H](https://doi.org/10.1039/D1CP05436H)

formable batteries and even structural components with energy storage capabilities.

As our multidisciplinary team of researchers in the area of materials for energy grows, so do the application areas of the tools and knowledge we generate. In addition to batteries beyond lithium-ion, our researchers develop *in-silico* new catalysts with higher efficiency to produce strategic energy carriers.

[1] M. Rana, A. Pendashteh, R. S. Schäuferle, J. Gispert, J.J. Vilatela. - Eliminating Solvents and Polymers in High-Performance Si Anodes by Gas-Phase Assembly of Nanowire Fabrics, *Advanced Energy Materials*, 2022, DOI: [10.1002/aenm.202103469](https://doi.org/10.1002/aenm.202103469)

[2] N. Boaretto, B. Dávila, S. Sevilla, G. García, A. Mikhanchan, M. Rana, A. Yusuf, L. Ubierna Martínez, M. Castillo García, J. Palma, D.-Y. Wang, R. Marcilla, J.J. Vilatela. - Thermoconformable, Flexible Lithium-Ion Batteries. - *Advanced Materials Technologies*, 2022, DOI: [10.1002/admt.202101635](https://doi.org/10.1002/admt.202101635)

[3] E. Senokos, Y. Ou, J.J. Torres, F. Sket, C. González, R. Marcilla, J.J. Vilatela. - Energy storage in structural composites by introducing CNT fiber/polymer electrolyte interleaves. *Scientific Reports* 8, 3407, 2018. DOI: [10.1038/s41598-018-21829-5](https://doi.org/10.1038/s41598-018-21829-5)

[4] C. Martínez-Alonso, J. M. Guevara-Vela, J. Llorca. - Understanding the effect of mechanical strains on the catalytic activity of transition metals. *physical chemistry chemical physics* 8, 24, 4832-4842, 2022. DOI: [10.1039/D1CP05436H](https://doi.org/10.1039/D1CP05436H)

Hacia la inteligencia artificial para el diseño y la fabricación de materiales avanzados

Towards artificial intelligence for design and manufacturing of advanced materials

En nuestro centro sabemos que acelerar el descubrimiento de materiales es una de las contribuciones disruptivas de la IA en la ciencia e ingeniería de materiales

Autores:

Carlos González, Investigador Senior, Responsable del Grupo de Materiales Compuestos Estructurales en IMDEA Materiales y Catedrático de la Universidad Politécnica de Madrid .

Maciej Haranczyk, Investigador Senior, Responsable del Grupo de Descubrimiento de Nuevos Materiales mediante Medios Computacionales en IMDEA Materiales.

Federico Sket, Investigador Senior, Responsable del Grupo de Procesado y caracterización in-situ de materiales en IMDEA Materiales.

Juan José Vilatela, Investigador Senior, Responsable del grupo de Nanocompuestos Multifuncionales en IMDEA Materiales.

La consecución de muchos de los [Objetivos de Desarrollo Sostenible \(ODS\) promovidos por la Sociedad de Naciones Unidas](#) es también una de las prioridades de la [Unión Europea](#) para proteger el medio ambiente de las próximas generaciones. Promover el uso eficiente de los materiales comenzando desde su diseño hasta la propia fabricación y su vida útil en servicio aumentará la eficiencia del sistema reduciendo también la huella medioambiental. Hoy en día, el coste de no producir materiales óptimos a la primera es enorme en términos de desechos, consumo de energía, pérdida de producción y reparación. Por lo tanto, el enfoque fenomenológico clásico en el que se diseña y fabrica un material mediante ensayos de prueba y error dará paso a un nuevo paradigma en el que la ciencia de materiales y la modelización computacional evolucionan en una hibridación perfecta con la inteligencia artificial (IA). Hoy en día, la IA se está incorporando con gran éxito en muchos aspectos de la sociedad, desde la traducción automática de idiomas, los sistemas de visión por ordenador y la conducción autónoma hasta la detección y clasificación de tumores mediante imágenes médicas [1].

La capacidad de la IA para detectar automáticamente patrones complejos ocultos dentro de los datos, con la versatilidad de los algoritmos cognitivos en la optimización del diseño y la fabricación de

Accelerating materials discovery is one of the disruptive contributions of AI in materials science at IMDEA Materials

Authors:

Carlos González, Senior Researcher, Head of Structural Composites Group at IMDEA Materials and Full Professor at Polytechnic University of Madrid.

Maciej Haranczyk, Senior Researcher, Head of Computational and Data-Driven Materials Discovery Group at IMDEA Materials.

Federico Sket, Senior Researcher, Head of In-situ processing and mechanical characterization of materials at IMDEA Materials.

Juan José Vilatela, Senior Researcher, Head of Multifunctional Nanocomposites Group at IMDEA Materials

Achievement of many of the [United Nations Sustainable Development Goals \(SDG\)](#) remains among the priorities of the [European Union](#) to protect the environment for the next generations. Promoting the efficient use of materials starting from their early design to the manufacturing and service life will increase overall system efficiency while reducing the environmental footprint. Even today, the burden of the cost of not producing optimum at right-first-time materials is enormous in terms of scraps, energy consumption, lost production and rework. Therefore, the classical phenomenological approach to design and manufacture materials guided by trial-and-error gives way to a new paradigm in which material science and computational modelling evolve in a seamless hybridisation with artificial intelligence (AI). Nowadays, AI is successfully incorporated across society, from automated speech translation, computer vision systems and autonomous driving to reliable detection and classification of tumours by medical imaging [1].

AI's ability to detect and automatically detect complex patterns hidden in large data sets while using cognitive schemes for optimising materials design and manufacturing is nowadays offering revolutionary opportunities in material science. IMDEA Materials

materiales, ofrece hoy en día oportunidades revolucionarias. IMDEA Materiales está incorporando continuamente estos métodos tanto en el diseño inicial como en la fabricación final, así como en los procesos intermedios de inspección para garantizar la calidad de los materiales o piezas fabricadas. Como ejemplos de ello, se resumen brevemente los proyectos IND-9819 & TEMACON & MAT4.0-CM (Comunidad de Madrid), DOMMINIO (EU – HORIZONTE 2020) y NMGC (Departamento de Energía de EE.UU.).

En nuestro centro sabemos que acelerar el descubrimiento de materiales es una de las contribuciones disruptivas de la IA en la ciencia e ingeniería de materiales. En este sentido, la posibilidad de realizar cribados computacionales de alto rendimiento de materiales, ha permitido la evaluación masiva de candidatos *in-silico* que ha llevado al descubrimiento de nuevos compuestos metal-orgánicos para aplicaciones de almacenamiento, separación y catálisis sin necesidad de recurrir a costosas campañas experimentales [2]. Este marco de cribado computacional se ve potenciado por el uso de modelos subrogados de aprendizaje automático que combinan datos sintéticos generados con herramientas de simulación tradicionales (atómico-molecular-continuo) junto a datos experimentales. Del mismo modo, estos modelos de aprendizaje automático pueden también generarse a partir de datos experimentales como por ejemplo, las arcillas nanoporosas, permitiendo posteriormente explorar todo las posibilidades de estos materiales [3] (Figura 1).

Durante los procesos de fabricación, se generan y registran automáticamente una enorme cantidad de datos experimentales que no son utilizados posteriormente en su totalidad. IMDEA Materiales, en el marco del proyecto TEMACON, está implementando herramientas de IA mediante el uso de información registrada por sensores para clasificar las distorsiones que se generan durante la inyección de materiales compuestos estructurales (Figura 2). Estas técnicas permiten generar gemelos digitales de procesos de fabricación que, en combinación con algoritmos de aprendizaje por refuerzo, dotarán en el futuro a los sistemas producción de una mayor resiliencia frente a los fallos. El objetivo final es desarrollar un sistema que aplique medidas correctivas durante el propio proceso de fabricación garantizando la calidad final del material compuesto estructural. Sin embargo, es importante tener en cuenta, que una vez fabricado el material, éste puede contener defectos en forma de porosidades y delaminaciones, por lo que es necesaria también una fase de inspección. IMDEA Materiales y sus colaboradores están desarrollando métodos de IA dentro del proyecto MAT 4.0-CM para mejorar las inspecciones por ultrasonidos. El procedimiento pretende aumentar la resolución ultrasónica mediante el uso de datos adquiridos con tomografía computarizada de rayos X.

Por último, la IA también puede utilizarse durante el periodo de servicio de las estructuras que contienen sensores integrados. El proyecto DOMMINIO pretende utilizar sensores formados por hilos de nanotu-

is continuously incorporating these methods from early design to the final manufacturing, and quality inspection and examples of that, IND-9819 & TEMACON & MAT4.0 (regional government of Madrid), DOMMINIO (H2020) and NMGC (US Dept. of Energy) projects will be summarised briefly.

Accelerating materials discovery is one of the disruptive contributions of AI in materials science at IMDEA Materials. The possibility of high-throughput computational screening of materials enabling the massive evaluation of *in-silico* candidates permitted the discovery of metal-organic frameworks for storage, separations and catalysis applications without extensive experimental work [2]. This computational screening framework is boosted by using machine learning surrogate models that combine synthetic data generated with traditional simulation tools (atomic-molecular-continuum) and experimental data. Similarly, machine learning models can be built using limited experimental data on nanoporous clays, and then used to explore the entire design space of these materials [3] (Figure 1).

An enormous amount of non-exploited experimental data is automatically recorded with sensors during manufacturing. IMDEA Materials is introducing AI tools in the TEMACON project by using information recorded through sensors to classify processing disturbances occurring during the injection of structural composites (Figure 2). Such techniques enabled the generation of digital twins for processing that, in combination with reinforcement learning algorithms, will provide manufacturing systems with resilient capabilities against processing disturbances. The idea is to implement on-the-fly processing policies that will ensure the final quality of the structural composite. However, once the material is produced, it can contain traces of defects in the form of porosities and delaminations, so inspection is required. IMDEA Materials and collaborators are developing AI methods within the MAT 4.0 project to enhance ultrasonic inspections. The procedure aims to augment resolution by using data acquired with X-ray computer tomography.

Lastly, AI can also be used during service operations of structures containing embedded sensors. The DOMMINIO project aims at using advanced carbon nanotube yarns embedded in structural carbon composites as deformation sensors. The AI system is trained to search for specific data patterns in the sensor records that identify the position, size and strength of damage produced during in-service operations of composite structures.

bos de carbono embebidos en compuestos estructurales de carbono como sensores de deformación. El sistema de IA está entrenado para buscar patrones de datos específicos en los registros de los sensores que identifiquen la posición, el tamaño y la intensidad de los daños producidos durante las operación en servicio de las estructuras de material compuesto.

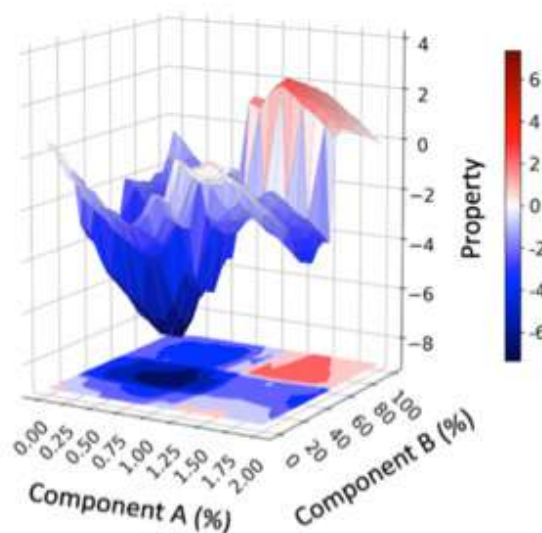


Figura 1. Relación entre las propiedades físicas y la composición del material de una estructura de material compuesto nanoporosa. Los datos se generaron con un modelo de aprendizaje automático entrenado con datos experimentales.

Figure 1. Relation between physical properties and material composition of composite structure involving nanoporous claus. The data was produced with machine learning model trained on experimental data.

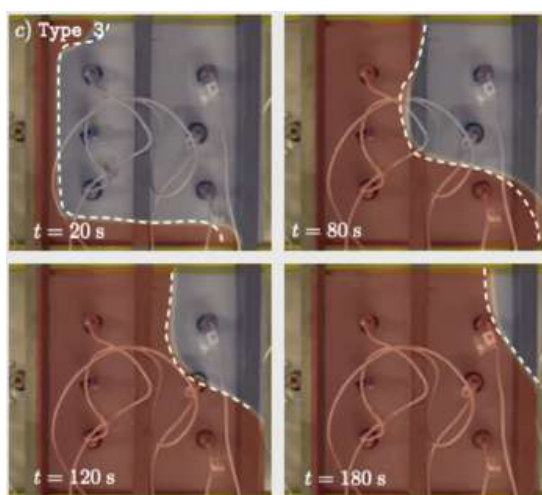


Figura 2. Un gemelo digital de la evolución del frente de flujo para el proceso de fabricación por inyección de resina (rojo=material impregnado, gris=material seco). El sistema de IA lee la información de un conjunto de sensores de presión distribuidos y la transforma en la predicción de la evolución del flujo frontal (líneas punteadas).

Figure 2. A digital twin of the flow front evolution for resin injection manufacturing process (red=impregnated material, grey=dry material). The AI system reads information from a set of pressure sensors distributed and transforms into the prediction of the front flow evolution (dotted lines).

[1] Artificial Intelligence Index Report 2022, Stanford University. HAI Human-Centered Artificial Intelligence.

[2] A.S. Krishnapriyan, M. Haranczyk, D. Morozov. -Topological Descriptors Help Predict Guest Adsorption in Nanoporous Materials, J. Phys. Chem. C, 124, 9360–9368, 2020.

[DOI:10.1021/acs.jpcc.0c01167](https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.0c01167)

[3] G. Lo Dico, A. Nuñez, A. Peña, V. Carcelén, M. Haranczyk. - Machine-learning-accelerated multimodal characterisation and multi-objective design optimisation of natural porous materials, Chem. Sci., 12, 9309—9317, 2021. [DOI:10.1039/d1sc00816a](https://doi.org/10.1039/d1sc00816a)

[4] J. Fernández-León, K. Keramati, D. Garoz, L. Baumela, C. Giraldo, C. González. - A machine learning strategy for race-tracking detection during manufacturing of composites by liquid moulding, Integrating Materials and Manufacturing Innovation, 2022.

[DOI:10.3390/jcs4020071](https://doi.org/10.3390/jcs4020071)

[1] Artificial Intelligence Index Report 2022, Stanford University. HAI Human-Centered Artificial Intelligence.

[2] A.S. Krishnapriyan, M. Haranczyk, D. Morozov. -Topological Descriptors Help Predict Guest Adsorption in Nanoporous Materials, J. Phys. Chem. C, 124, 9360–9368, 2020.

[DOI:10.1021/acs.jpcc.0c01167](https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.0c01167)

[3] G. Lo Dico, A. Nuñez, A. Peña, V. Carcelén, M. Haranczyk. - Machine-learning-accelerated multimodal characterisation and multi-objective design optimisation of natural porous materials, Chem. Sci., 12, 9309—9317, 2021.

[DOI:10.1039/d1sc00816a](https://doi.org/10.1039/d1sc00816a)

[4] J. Fernández-León, K. Keramati, D. Garoz, L. Baumela, C. Giraldo, C. González. - A machine learning strategy for race-tracking detection during manufacturing of composites by liquid moulding, Integrating Materials and Manufacturing Innovation, 2022.

[DOI:10.3390/jcs4020071](https://doi.org/10.3390/jcs4020071)

Andamios biorreabsorbibles personalizados para ingeniería de tejidos en aplicaciones ortopédicas

Personalized bioresorbable scaffolds for tissue engineering in orthopaedic applications

La experiencia del Instituto IMDEA Materiales en las áreas de fabricación aditiva, caracterización de materiales, simulación del comportamiento mecánico y resistencia a la corrosión se ha ampliado recientemente al área de materiales para la salud con la apertura de un nuevo laboratorio de cultivo celular

Autores:

J. LLorca, Director Científico, Responsable del Grupo Bio/Chemo/Mecánica de Materiales en IMDEA Materiales y Catedrático de la Universidad Politécnica de Madrid

C. González, Investigador Senior, Responsable del Grupo de Materiales Compuestos Estructurales en IMDEA Materiales y Catedrático de la Universidad Politécnica de Madrid

F. Sket, Investigador Senior, Responsable del Grupo de Procesado y caracterización in-situ de materiales en IMDEA Materiales

J. M. Molina-Aldareguía, Director Adjunto, Responsable del Grupo de Micro- y Nano-mecánica en IMDEA Materiales

M. Echeverry-Rendón, Investigador Posdoctoral Senior en IMDEA Materiales

Un problema de salud importante en Europa, especialmente con el envejecimiento de la población, es la fractura o daño de tejidos óseos como resultado de un trauma o impacto de alta energía, resección de un tumor, infección o enfermedades osteodegenerativas. Este problema puede tratarse mediante: (i) la implantación de dispositivos de fijación interna (como placas óseas, clavos intramedulares y/o tornillos) para estabilizar el tejido dañado o (ii) la aplicación de tratamientos de regeneración tisular basados en la reconstrucción quirúrgica, utilizando injertos óseos o sintéticos basados en andamios porosos.

Los dispositivos de fijación y los andamios porosos actuales para la cicatrización ósea se fabrican mediante fabricación aditiva a partir de aleaciones biocompatibles de Ti y Co o de aceros inoxidable. Estas aleaciones metálicas son biocompatibles y proporcionan la capacidad de carga necesaria, mientras que la fabricación aditiva permite fabricar andamios e implantes específicos para cada paciente a partir de imágenes médicas de tomografía asistida por ordenador en ortopedia y traumatología. Sin embargo, no son biodegradables y, por

The expertise of IMDEA Materials Institute in the areas of additive manufacturing, material characterization, simulation of mechanical behavior and corrosion resistance has been recently extended in the area of materials for health care with the opening of a new cell culture laboratory

Authors:

J. LLorca, Scientific Director, Head of Bio/Chemo/Mechanics of Materials Group at IMDEA Materials and Full Professor at Polytechnic University of Madrid

C. González, Senior Researcher, Head of Structural Composites Group at IMDEA Materials and Full Professor at Polytechnic University of Madrid

F. Sket, Senior Researcher, Head of In-situ processing and mechanical characterization of materials at IMDEA Materials

J. M. Molina-Aldareguía, Deputy Director, Head of Micromechanics and Nanomechanics Group and Associate Professor at Polytechnic University of Madrid

M. Echeverry-Rendón, Senior Research Associate at IMDEA Materials

One important health issue in Europe, especially with the aging of the population, is bone (tissue) fracture (damage) as a result of high-energy impact or trauma, tumor resection, infection or osteo-degenerative diseases. This problem can be managed by: (i) the implantation of internal fixation devices (such as bone plate, intramedullary nail, and screw) to stabilize the damaged tissue or (ii) applying tissue regeneration (bone grafting) treatments such as organ transplantation or surgical reconstruction (by using porous scaffolds).

The current state-of-the-art for fixation devices and porous scaffolds for bone healing are fabricated by additive manufacturing from biocompatible Ti and Co alloys or stainless steels. These metallic alloys are biocompatible and provide the necessary load bearing capability while additive manufacturing allows the fabrication of patient-specific scaffolds and implants from computer-assisted tomography medical images in orthopaedics and traumatology. However, they are not biodegradable and, thus, a

lo tanto, a menudo es necesaria una segunda cirugía para retirar los implantes una vez que han cumplido su propósito, ya que podrían provocar irritación física permanente o reacciones locales inflamatorias crónicas. Estas limitaciones pueden superarse mediante el uso de metales biodegradables (Fe, Mg, Zn) o polímeros (ácido poliláctico) y sus compuestos que permitan la degradación progresiva del andamio *in vivo* mientras los productos de la corrosión se eliminan y/o metabolizan. Como resultado, el implante se disuelve completamente después de la curación del tejido sin que queden residuos del mismo.

La experiencia del Instituto IMDEA Materiales en las áreas de fabricación aditiva, caracterización de materiales, simulación del comportamiento mecánico y resistencia a la corrosión se ha ampliado recientemente al área de materiales para la salud con la apertura de un nuevo laboratorio de cultivo celular y la atracción de investigadores con talento en esta área. Con el apoyo de varios proyectos de investigación europeos (BioImplant), nacionales (Topomag3D) y regionales (i-IMPLANTS-CM), IMDEA Materiales está desarrollando actualmente una nueva generación de materiales para implantes temporales a partir de metales o polímeros bioabsorbibles y biocompatibles y/o sus compuestos con una combinación óptima de propiedades mecánicas, tasa de degradación y biocompatibilidad. Se fabrican andamios porosos específicos para cada paciente a partir de estos materiales mediante diferentes técnicas de fabricación aditiva. Se implantan en las regiones dañadas para promover el crecimiento del tejido óseo mientras el andamio se degrada y absorbe progresivamente en el cuerpo humano.

Por ejemplo, se han fabricado andamios de porosidad abierta de la aleación WE43 Mg con una excelente precisión dimensional mediante fusión selectiva por láser [1] (Figura 1). La velocidad de corrosión y la biocompatibilidad se adaptaron mediante la modificación de la superficie a través de tratamientos de oxidación electrolítica por plasma, mientras que la degradación temporal de las propiedades mecánicas como resultado de la corrosión se evaluó mediante simulaciones numéricas [2]. Otra línea de investigación apasionante se centra en el desarrollo de compuestos poliméricos-metálicos biorreabsorbibles. Entre los polímeros biodegradables, el ácido poliláctico (PLA) es uno de los más utilizados y puede procesarse fácilmente mediante la fabricación de filamentos fundidos. Sin embargo, las propiedades mecánicas, la tasa de degradación y los productos de degradación del PLA no son óptimos para todas las aplicaciones biomédicas, pero pueden optimizarse mediante la adición de partículas y/o fibras metálicas biodegradables (Mg, Zn) para formar compuestos polímero-metal [3]. Los compuestos con diferentes propiedades (en función de la fracción volumétrica y la forma de los refuerzos metálicos) pueden combinarse en una sola impresora con diferentes boquillas de extrusión para fabricar andamios multimaterial en los que las propiedades mecánicas, la tasa de degradación y la biocompatibilidad se optimizan para cada región del andamio (Fig. 2).

second surgery is often needed to remove the implants once their purpose is fulfilled because they might lead to permanent physical irritation/or and chronic inflammatory local reactions. These limitations can be overcome through the use of biodegradable metals (Fe, Mg, Zn) or polymers (poly-lactic acid) and their composites that allow the progressive degradation of the scaffold *in vivo* while the corrosion products are eliminated and/or metabolised. As a result, the implant dissolves completely after tissue healing with no implant residues.

The expertise of IMDEA Materials Institute in the areas of additive manufacturing, material characterization, simulation of mechanical behavior and corrosion resistance has been recently extended in the area of materials for health care with the opening of a new cell culture laboratory and the attraction of talented researchers in this area. Supported by several European (BioImplant), national (Topomag3D) and regional (i-IMPLANTS-CM) research projects, IMDEA Materials is currently developing a new generation of materials for temporary implants from bioresorbable and biocompatible metals or polymers and/or their composites with an optimum combination of mechanical properties, degradation rate and biocompatibility. Patient-specific, porous scaffolds from these materials are manufactured by different additive manufacturing techniques. They are implanted in the damaged regions to promote bone tissue growth while the scaffold is progressively degraded and absorbed in the human body.

For instance, open-porous scaffolds of WE43 Mg alloy with excellent dimensional accuracy have been manufactured by laser powder bed fusion [1] (Figure 1). The corrosion rate and biocompatibility were tailored by surface modification through plasma electrolytic oxidation while the degradation of mechanical properties with time as a result of corrosion was assessed by means on numerical simulations [2]. Other exciting research line is focussed in the development of bioresorbable polymer-metal composites. Among biodegradable polymers, poly-lactic acid (PLA) is one of the most widely used and can be easily processed by fused filament fabrication. However, the mechanical properties, degradation rate and degradation products of PLA are not optimum for all biomedical applications but they can be tailored by the addition of biodegradable metallic particles and/or fibers (Mg, Zn) to form polymer-metal composites [3]. Composites with different properties (as function of the volume fraction and shape of the metallic reinforcements) can be combined in a single printer with different extrusion nozzles to manufacture multimaterial scaffolds in which the mechanical properties, degradation rate and biocompatibility have been optimized for each region of the scaffold (Fig. 2).

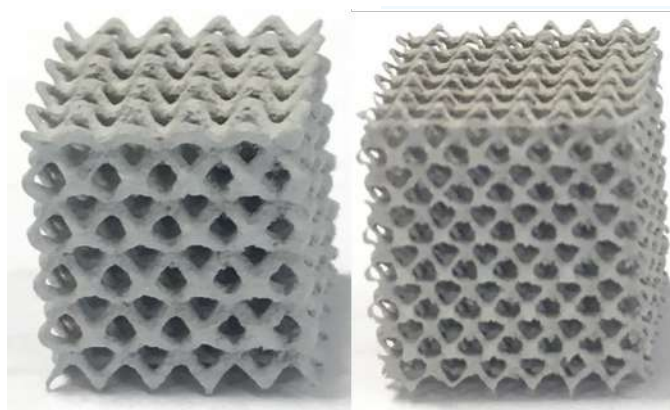


Figura 1. Andamios porosos de WE43 Mg con estructura cúbica centrada en el cuerpo y diferentes espesores de pilares fabricados mediante fusión selectiva por láser. Las dimensiones de los andamios son 10 x 10 x 10 mm³. [1]

Figure 1. Porous WE43 Mg scaffolds with body-center cubic lattice and different strut thickness manufactured by selective laser melting. The dimensions of the scaffolds are 10 x 10 x 10 mm³. [1].

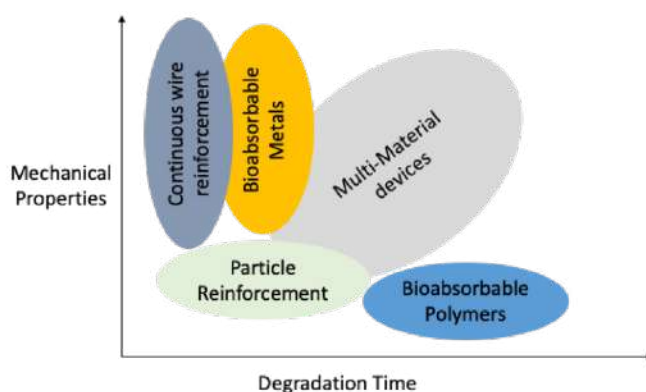


Figura 2. Propiedades mecánicas frente al espacio de diseño del tiempo de degradación para los compuestos multimaterial de polímero-metal.

Figure 2. Mechanical-properties vs. degradation time design space for multimaterial polymer-metal composites.

[1] M. Li, F. Benn, T. Derra, N. Kroeger, M. Zinser, R. Smeets, J. M. Molina-Aldareguía, A. Kopp, J. LLorca. - Microstructure, mechanical properties, corrosion resistance and cytocompatibility of WE43 Mg alloy scaffolds fabricated by laser powder bed fusion for biomedical applications. Materials Science and Engineering C, 119, 111623, 2021. DOI:10.1016/j.msec.2020.111623

[2] M. Marvi-Mashhadi, W. Ali, M. Li, C. González, J. LLorca. - Simulation of corrosion and mechanical degradation of additively manufactured Mg scaffolds in simulated body fluid. Journal of the Mechanical Behavior of Biomedical Materials, 126, 104881, 2022. DOI:10.1016/j.jmbbm.2021.104881

[3] C. Pascual-González, C. Thompson, J. de la Vega, N. Biurrun, J. P. Fernández-Blázquez, I. Lizarralde, D. Herráez, C. González, J. LLorca. Processing and properties of PLA/Mg filaments for 3D printing of scaffolds for biomedical applications. Rapid Prototyping, in press, 2022. DOI: 10.1108/RPJ-06-2021-0152

[1] M. Li, F. Benn, T. Derra, N. Kroeger, M. Zinser, R. Smeets, J. M. Molina-Aldareguía, A. Kopp, J. LLorca. - Microstructure, mechanical properties, corrosion resistance and cytocompatibility of WE43 Mg alloy scaffolds fabricated by laser powder bed fusion for biomedical applications. Materials Science and Engineering C, 119, 111623, 2021. DOI:10.1016/j.msec.2020.111623

[2] M. Marvi-Mashhadi, W. Ali, M. Li, C. González, J. LLorca. - Simulation of corrosion and mechanical degradation of additively manufactured Mg scaffolds in simulated body fluid. Journal of the Mechanical Behavior of Biomedical Materials, 126, 104881, 2022. DOI:10.1016/j.jmbbm.2021.104881

[3] C. Pascual-González, C. Thompson, J. de la Vega, N. Biurrun, J. P. Fernández-Blázquez, I. Lizarralde, D. Herráez, C. González, J. LLorca. Processing and properties of PLA/Mg filaments for 3D printing of scaffolds for biomedical applications. Rapid Prototyping, in press, 2022. DOI: 10.1108/RPJ-06-2021-0152

ITP Aero e IMDEA Materiales desarrollan un programa de I+D para simular la fabricación en 3D pionero en el mundo

ITP Aero and IMDEA Materials develop a pioneer R&D program to simulate 3D manufacturing processes

ITP Aero e IMDEA Materiales colaboran en un programa de I+D, llamado ENVIDIA, que tiene como objetivo desarrollar software capaz de simular la producción de componentes aeronáuticos usando tecnologías de fabricación aditiva (también conocido como impresoras 3D).

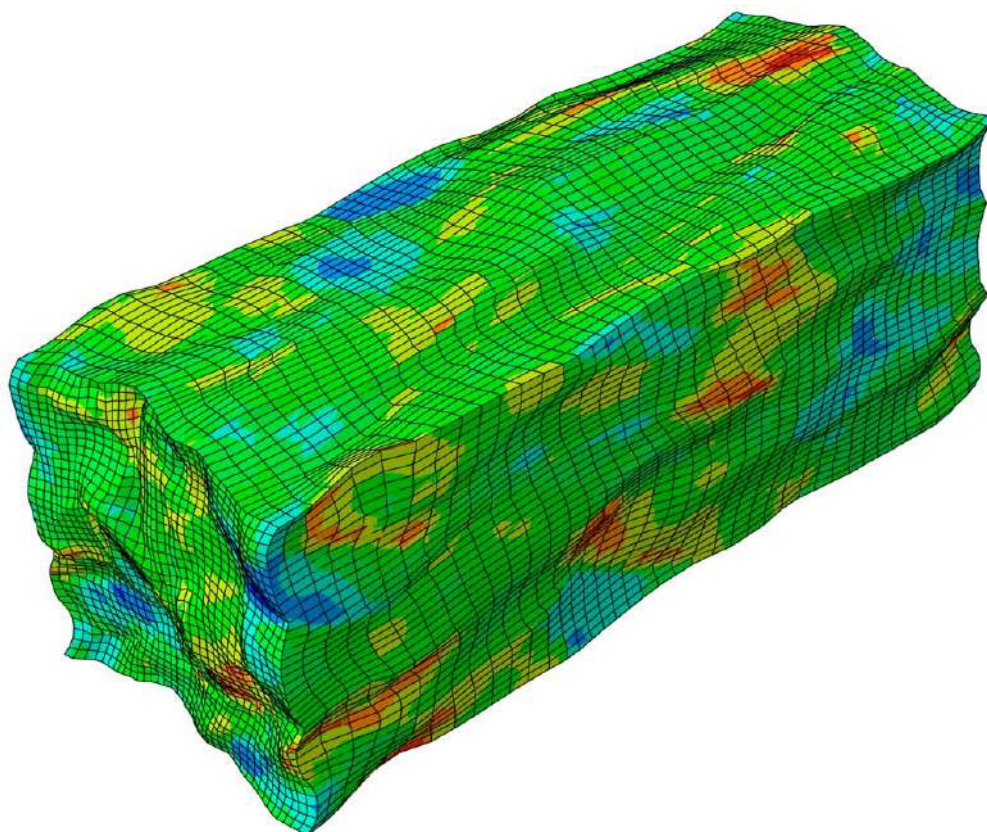


Para más información pulsa aquí

ITP Aero and IMDEA Materials collaborate in an R&D program named ENVIDIA, whose goal is the development of software capable of simulating the production of aeronautic components by additive manufacturing technologies.



for more information clic here



madrimsd.org

suplemento
notiweb



instituto
imdea
materials



 **fundación** para el
conocimiento
madrid