

Patentes

Con titanio, níquel y nitrógeno

Eafitenses inventan material para recubrir piezas industriales



Foto: Robinson Henao

Los experimentalistas Claudia Constanza Palacio Espinosa y Mauricio Arroyave Franco en el Laboratorio de Física Aplicada, donde se crea el nuevo material.

Un equipo interdisciplinario de la Universidad desarrolló un material en forma de recubrimiento, con alta dureza, que lo hace resistente al desgaste. Por este invento, mediante Resolución 37510 de 2017, la Superintendencia de Industria y Comercio le otorgó a EAFIT la patente 26, de 35 con que contaba hasta finales de 2017.

Ana María Jaramillo Villegas

Colaboradora

Plásticos biodegradables, pinturas que descontaminan el aire, espumas metálicas e hilos resistentes como seda de araña son algunos de los nuevos materiales que trae el futuro cercano.

Estas innovaciones ya no se buscan al combinar elementos del mundo macroscópico (que se ven a simple vista), sino a través de la comprensión y la intervención de materiales en el nivel atómico y molecular. Esta ciencia, que implica conocimientos de ingeniería, química, física aplicada, cuántica y modelación matemática, está en todo su furor.

Y la Universidad EAFIT está a la vanguardia. En agosto de 2017 cuatro investigadores del Grupo de Investigación en Electromagnetismo Aplicado (Gema) del Departamento de Ciencias Físicas de la Universidad EAFIT, que también hacen parte de la *spin off* intrauniversitaria Tecnoplasma, mediante Resolución 37510 de la Superintendencia de Industria y Comercio, obtuvieron una patente de invención para el nuevo *Material ternario de titanio, níquel y nitrógeno*, que se aplica como recubrimiento.

"Nos propusimos desarrollar materiales que no existieran y que permitieran a las piezas, por ejemplo, a las del sector metalmeccánico, comportarse mejor frente al desgaste", explica Mauricio Arroyave Franco, jefe del Departamento de Ciencias Físicas de la Universidad y uno de los experimentalistas del equipo.

Los investigadores sabían que la línea en nuevos materiales para el recubrimiento era prometedor. Por ejemplo, todos los dispositivos electrónicos del sector telecomunicaciones presentes en la vida

cotidiana ya tienen incorporados películas para potenciar sus propiedades.

También en la industria aeroespacial, la metalmeccánica y la biomédica demandan nuevos compuestos. El Gema, por ejemplo, trabaja en el desarrollo de materiales biocompatibles para recubrir implantes craneales, de manera que facilite la asimilación por parte del cuerpo.

Probar en el laboratorio

En el caso de esta patente –la 26 de 35 con que hasta la fecha cuenta la Institución– se buscaba que el desarrollo aportara dureza para extender la durabilidad de las piezas donde se aplicara. Una opción era apropiar algunos materiales ya existentes y darles este nuevo uso, pero el grupo se propuso elaborar algo que aún no existiera.

La tecnología de los recubrimientos por plasma está poco establecida en Colombia. El reto es que esta industria comience a desarrollarse.

El método tradicional para encontrar compuestos novedosos era el ensayo y error. Comprar insumos, ir al laboratorio, revolver, ensayar y descartar. Una y otra vez: echarle una gotica o dos y mirar cómo cambia el color y si hay nuevas propiedades. Hoy en día se hace diferente. Al laboratorio se llega a probar, no a buscar.

Jorge León David Caro, doctor en Físicoquímica Molecular y uno de los investigadores teóricos del



Molécula de nitruro de titanio-niquel, nuevo material patentado por EAFIT.

Foto: Robinson Henao

equipo, recuerda que un día de café Mauricio Arroyave le sugirió mirar con un software la combinación de tres elementos químicos para saber en teoría qué se podía obtener. Esto les abrió a los docentes la puerta hacia nuevas metodologías: hacer una búsqueda teórica previa, a través de la modelación, antes de realizar cualquier experimento.

El estudio a escala atómica y molecular permite predecir un rango de composiciones químicas en el que los materiales pueden exhibir determinadas propiedades.

Diseño computacional

El clúster computacional con el que cuenta la Universidad EAFIT (Apolo) –explica Claudia Constanza Palacio Espinosa, la otra experimentalista del equipo y doctora en Ciencia de los Materiales– les permite ensayar las veces que requieran sin agregar costos al proyecto. Al simular, pueden identificar si hay un material prometedor y, luego sí, ir a la experimentación.

En este proyecto, por ejemplo, se redujo el tiempo de laboratorio a dos semanas. "Podría haber tomado seis meses si no fuera por la aplicación de los conocimientos teóricos en mecánica cuántica y simulaciones computacionales corridas en Apolo, aclara Mauricio.

El diseño computacional de materiales es un

método relativamente nuevo para hacer predicciones con simulaciones computacionales, basadas en teorías físicas, que permiten establecer aproximaciones de las propiedades físicas y químicas de los materiales, a escala de átomos y moléculas. Esto ahorra tiempo de laboratorio y aumenta la probabilidad de éxito en la síntesis de dichos materiales, a la vez que se puede enfocar mejor su uso en la industria.

Con métodos aleatorios, el programa propuso algunas combinaciones de los elementos y luego, con la teoría de la mecánica cuántica, se calcularon las estructuras más estables y que tuvieran mayor probabilidad de poder ser producidas experimentalmente.

También se calculó la dureza, en el contexto teórico, que era la variable que buscaban los experimentalistas. Además, la teoría no solo aportó datos respecto a la cantidad en que se debían combinar los elementos, sino también sobre otras variables del experimento.

Interpretación a escala atómica

El reto estaba en cómo interpretar los resultados de la escala atómica en el mundo macro que es en el que vivimos en la cotidianidad. La simulación matemática modela en átomos, con pocas moléculas que interactúan. En el laboratorio, en cambio, es a otra escala. Es como asumir que un ladrillo se comportará igual que un edificio. Las afectaciones en los dos niveles son diferentes.

Por eso, Mario Elkin Vélez Ruiz, el otro investigador



Mario Vélez, Claudia Palacio, Jorge David y Mauricio Arroyave.

teórico del equipo y magíster en Física, recuerda que desde la teoría se dan criterios como insumos. Es decir, el estudio a escala atómica y molecular posibilita predecir un rango de composiciones químicas en el que los materiales pueden exhibir determinadas propiedades, pero es el laboratorio el que tiene la última palabra.

Para el caso del nuevo material las concordancias fueron muy afortunadas. Los teóricos predijeron la existencia de un material, poco reportado en la literatura y con un alto índice de dureza, y los experimentalistas lo hicieron existir por primera vez en los laboratorios del Instituto Coppe en Brasil, ya que para esa época en el país no existía la infraestructura de laboratorios para realizar los experimentos.

Posteriormente caracterizaron el material, es decir, midieron sus propiedades para corroborar los resultados que se habían predicho en las simulaciones, en relación con la composición química y la dureza.

Para lograr reproducir el compuesto en Colombia fue necesario adquirir un reactor de plasma tipo Magnetron Sputtering, que fue financiado por EAFIT y Colciencias como parte de un proyecto de investigación en el que también participaron los cuatro profesores. Este equipo está en el laboratorio de Física Aplicada del Centro de Laboratorios de la Universidad.

Dentro del reactor, los tres elementos precursores (titanio, níquel y nitrógeno), dos metales y un gas, se llevan a estado de plasma para hacer reaccionar los elementos entre sí y formar una película de algunos cientos de nanómetros de espesor en la superficie que se quiere recubrir.

Finalmente, este proceso que empezó “como una curiosidad científica” –en palabras de Claudia Palacio–, derivó en la patente. Por ahora sigue estandarizar los protocolos, generalizar la metodología para otros materiales y mirar cómo se comercializará el invento.

“Esta es un área de investigación que aún no tiene eco en la industria porque no se ha hecho la transferencia. La tecnología de los recubrimientos por plasma está poco establecida en Colombia. El reto es que esta industria comience a desarrollarse”.

Investigadores

Mauricio Arroyave Franco

Ingeniero electrónico y magíster en Física, Universidad Nacional de Colombia, sede Manizales. En la actualidad es estudiante del doctorado en Ingeniería de Materiales, en la Universidad de Antioquia. Es el jefe del Departamento de Ciencias Físicas (Escuela de Ciencias) de la Universidad EAFIT, donde es integrante del Grupo de Investigación en Electromagnetismo Aplicado y miembro de la *spin off* Tecnoplasma.

Claudia Constanza Palacio Espinosa

Ingeniera metalúrgica, Universidad Industrial de Santander; especialista en Diseño Mecánico, Universidad EAFIT; máster en Ciencia de los Materiales y doctora en Ciencia de los Materiales –con experticia y formación en síntesis y comportamiento mecánico de materiales metálicos y cerámicos–, de la Université de Limoges (Francia). Es integrante del Grupo de Investigación en Electromagnetismo Aplicado, profesora del Departamento de Ciencias Físicas (Escuela de Ciencias) e integrante de la *spin off* Tecnoplasma, de la Universidad EAFIT.

Jorge León David Caro

Químico, Universidad de Antioquia, y PhD en Físicoquímica Molecular, Universidad Andrés Bello (Chile). Integrante del Grupo de Investigación en Electromagnetismo Aplicado, profesor del Departamento de Ciencias Físicas, de la Escuela de Ciencias de la Universidad EAFIT e integrante de la *spin off* Tecnoplasma.

Mario Elkin Vélez Ruiz

Físico y magíster en Física, Universidad de Antioquia. Es investigador y profesor del Departamento de Ciencias Físicas, de la Escuela de Ciencias de la Universidad EAFIT e integrante de la *spin off* Tecnoplasma. Experto en mecánica cuántica, física del estado sólido y mecánica cuántica computacional.