

Santiago de Compostela, martes 3 de abril de 2012

La supercomputación ayudará a solucionar la 'osteoporosis' de los cementos

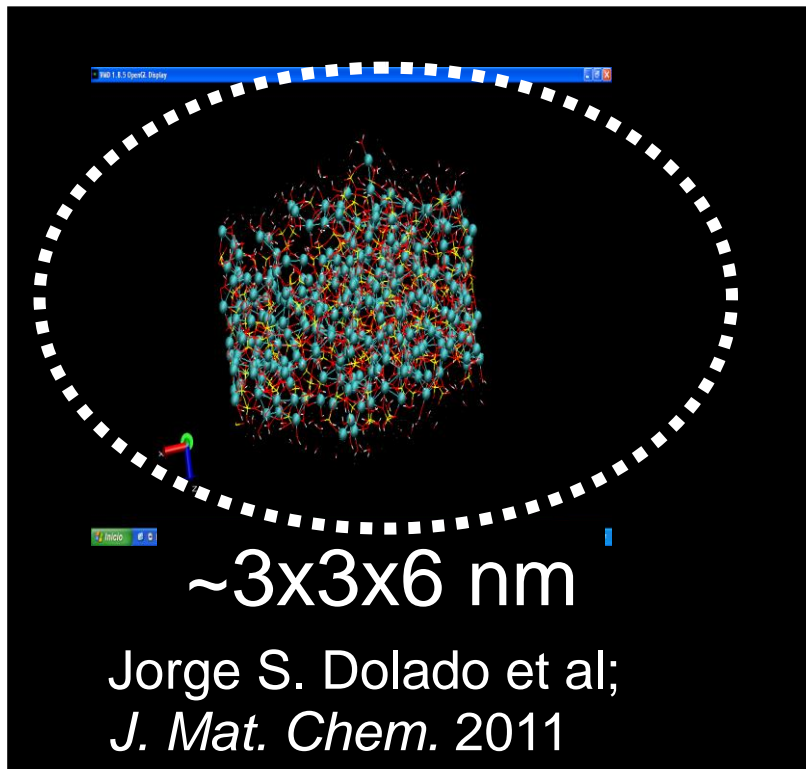
- Tecnalía y la Unidad de Materiales Nanoestructurales y Ecoeficientes del CSIC utilizan el CESGA para diseño computacional de nuevos materiales cementicios, dentro del proyecto CODICE (www.codice-project.eu)
- “*Las modernas técnicas de simulación computacional están permitiendo descifrar los entresijos de la nanoestructura cementicia*”, indica el investigador de Tecnalía, Jorge Sánchez Dolado.

Cálculos realizados por el CSIC y Tecnalía empleando la capacidad del Centro de Supercomputación de Galicia (CESGA) podrán ayudar en el futuro a conseguir cementos más duraderos, más resistentes a la pérdida de calcio -que recuerda a la osteoporosis humana- y capaces de soportar mejor el paso de los años y por tanto de hacer más seguras las construcciones en las que se empleen.

A pesar de que es el material más empleado en construcción, sólo por detrás del agua, y de que está presente en la gran mayoría de elementos constructivos -casas, puentes, embalses, etc-, los materiales cementicios se han estudiado principalmente desde el punto de vista de la ingeniería, siendo muy reciente una aproximación desde la ciencia de materiales que investiga las relaciones entre su composición y su comportamiento. Algo que está a cambiar gracias a trabajos como el que desarrolla la Unidad de Materiales Nanoestructurales y Ecoeficientes del Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC) en colaboración con el centro de investigación Tecnalía.

El investigador **Jorge Sánchez Dolado**, de Tecnalía, explica que desde hace unos años "se ha comenzado a realizar, principalmente en los Estados Unidos, una aproximación más científica en la investigación de los materiales cementicios que conjugaba el empleo de sofisticadas técnicas de caracterización como la nanoindentación con modernas técnicas de

simulación computacional y que está permitiendo descifrar los entresijos de la nanoestructura cementicia".



"Ladrillo básico" de la estructura cementicia, de acuerdo a las predicciones de dinámica molecular realizadas por Jorge S. Dolado y colaboradores, dentro del proyecto europeo CODICE, y que fueron publicadas en la revista 'Journal of Materials Chemistry'.

Proyecto CODICE

Este nuevo enfoque es el que están siguiendo los investigadores del CSIC y Tecnalia: los investigadores de dicha unidad asociada han participado recientemente en un proyecto europeo (COMputationally-Driven design of Innovative CEmentitious materials, CODICE; www.codice-project.eu), liderado por el propio Jorge Sánchez Dolado, y cuyo fin último era precisamente el diseño computacional de nuevos materiales cementicios.

Utilizando la capacidad del Centro de Supercomputación de Galicia (CESGA) "realizamos simulaciones de diferentes materiales y estudiamos cómo se ensamblan, digamos que estudiamos los 'ladrillos' fundamentales de estos materiales, o por hacer una comparación, su ADN", indica Sánchez Dolado.

La utilización de los supercomputadores permite simular el comportamiento de los materiales a nivel atómico, identificando los componentes fundamentales de los cementos, que son "bolas de unos cinco nanómetros" -un nanómetro es la unidad de longitud que equivale a una milmillonésima parte de un metro-. Así, es posible, utilizando el software idóneo, reproducir "cómo se ensamblan entre ellas y cómo cambian de propiedades", subraya el investigador, quien apunta que existen paralelismos con el comportamiento de los polímeros, macromoléculas de origen orgánico -como las de la celulosa o las de la seda- o sintéticas -como el nailon-.

Estudiar cómo se ensamblan esas bolas o 'ladrillos' fundamentales de los cementos hace posible conocer mejor los procesos de degradación y durabilidad que sufren. Actualmente ya se sabe que, como en el colesterol, hay cementos buenos y malos: los buenos son aquellos donde sus componentes aparecen "muy empaquetados" y resisten mejor "los ataques de degradación".

La investigación va encaminada, por un lado, a conseguir que los componentes buenos sean los que predominen en la composición del material cementante, y por el otro a conseguir mayor resistencia a un fenómeno similar al de la osteoporosis que afecta a los huesos de las personas: la pérdida de calcio. La penetración de humedad por los poros de las estructuras cementicias provoca la desaparición progresiva del calcio del esqueleto cementicio y "que éste se haga más frágil y al final se rompa", asegura Sánchez Dolado, un fenómeno para el que se buscan soluciones a través de la investigación.

El CESGA

El Centro de Supercomputación de Galicia (CESGA) que depende de la Consellería de Economía e Industria de la Xunta de Galicia y del Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC), es un organismo con una trayectoria de más de 18 años. Su objeto es fomentar y difundir servicios de cálculo intensivo e comunicaciones a las comunidades investigadoras galega e del CSIC, así como a aquellas empresas o instituciones que lo soliciten. <http://www.cesga.es>

Contacto:

Jorge S. Dolado

jorge.dolado@tecnalia.com

+34 647 40 33 13

