Research Club Scientia Vol. 4, No 4
Frecuencia: Octubre–Diciembre 2026
ISSN: 3103 - 1315
DOI: https://doi.org/10.65415/qkx5ch29

Inteligencia artificial aplicada al descubrimiento y diseño de nuevos materiales

Artificial Intelligence Applied to the Discovery and Design of New Materials

Intelligenza artificiale applicata alla scoperta e alla progettazione di nuovi materiali

Steven Alexander Quezada González[I]
squezadag2@unemi.edu.ec
ORCID: https://orcid.org/0009-0009-2847-7322
Facultad de Ciencias de la Ingeniería, Carrera Ingeniería Industrial, Universidad Estatal de Milagro, Ecuador

Jesús Benigno Crespo Correa[I]
jcrespoc12@unemi.edu.ec
ORCID: https://orcid.org/0009-0004-0785-5156
Facultad de Ciencias de la Ingeniería, Carrera Ingeniería Industrial, Universidad Estatal de Milagro, Ecuador

Josue Alexander Carranza Yunda[I]
jcarranzay@unemi.edu.ec
ORCID: https://orcid.org/0009-0007-5328-7606
Facultad de Ciencias de la Ingeniería, Carrera Ingeniería Industrial, Universidad Estatal de Milagro, Ecuador

Najid Jose Andrade Luna[I]
nandradel6@unemi.edu.ec
ORCID: https://orcid.org/0009-0007-4062-4095
Facultad de Ciencias de la Ingeniería, Carrera Ingeniería Industrial, Universidad Estatal de Milagro, Ecuador

Jorge Tomas Holguín Anzueles[I]
jholguina7@unemi.edu.ec
ORCID: https://orcid.org/0000-0003-4454-4184
Facultad de Ciencias de la Ingeniería, Carrera Ingeniería Industrial, Universidad Estatal de Milagro, Ecuador

Correspondencia: squezadag2@unemi.edu.ec

Artículo de Investigación

Recibido: 26/Noviembre/2026 **Publicado:** 27/Noviembre/2026

1. Facultad de Ciencias de la Ingeniería, Carrera Ingeniería Industrial, Universidad Estatal de Milagro, Ecuador

.

Resumen

Encontrar materiales que tengan propiedades específicas no es una tarea sencilla. Tradicionalmente, este trabajo ha requerido muchos ciclos de formulación, síntesis y pruebas, hasta encontrar una opción que funcione. En los últimos años, la inteligencia artificial, en especial el aprendizaje automático, el aprendizaje profundo y los modelos generativos, ha empezado a cambiar esta dinámica. Estas herramientas permiten analizar grandes cantidades de información, estimar propiedades y sugerir nuevas composiciones o estructuras. En este artículo se revisan quince publicaciones científicas proporcionadas para el trabajo, con el propósito de explicar cómo se está utilizando la inteligencia artificial en el descubrimiento y diseño de materiales, cuáles son sus principales aportes y qué dificultades siguen pendientes. La información se organizó en cinco temas: gestión de datos e informática de materiales; predicción de las relaciones entre composición, estructura y propiedades; diseño inverso y generación de candidatos; apoyo a la síntesis y caracterización; y laboratorios autónomos. Los estudios revisados presentan ejemplos en aleaciones (incluidas las refractarias de alta entropía), materiales bidimensionales, catalizadores, estructuras metal-orgánicas, materiales porosos, piezoeléctricos, metamateriales, polímeros y materiales electroquímicos para baterías y protección contra la corrosión. También muestran que combinar modelos de inteligencia artificial con principios físicos puede ayudar a conseguir predicciones más rápidas sin perder de vista su interpretación. Aun así, siguen existiendo retos relacionados con la calidad de los datos, la predicción de materiales poco conocidos, la comprobación experimental y los recursos computacionales necesarios. En general, la inteligencia artificial no reemplaza el trabajo de los investigadores ni las pruebas de laboratorio más bien, sirve como apoyo para elegir qué hipótesis estudiar y qué experimentos realizar.

Palabras clave: Inteligencia artificial, aprendizaje automático, ciencia de materiales, diseño inverso, descubrimiento de materiales

Abstract

Finding materials with specific properties is a challenging task. Traditionally, it has required repeated cycles of formulation, synthesis, and testing to identify a suitable option. In recent years, artificial intelligence, particularly machine learning, deep learning, and generative models, has begun to change this process. These tools can analyze large volumes of information, estimate properties, and suggest new compositions or structures. This article reviews fifteen scientific publications selected for the study to describe how artificial intelligence is used in materials discovery and design, what it contributes, and what challenges remain. The information was organized into five themes: data management and materials informatics, prediction of composition–structure–property relationships, inverse design and candidate generation, support for synthesis and characterization, and autonomous laboratories. The studies provide examples

involving alloys, including refractory high-entropy alloys, as well as two-dimensional materials, catalysts, metal–organic frameworks, porous materials, piezoelectrics, metamaterials, polymers, and electrochemical materials for batteries and corrosion protection. Combining artificial intelligence models with physical principles can speed up predictions while supporting their interpretation. Challenges remain in data quality, prediction for poorly understood materials, experimental validation, and computational resource requirements. Artificial intelligence supports researchers in selecting hypotheses and experiments, while laboratory testing remains essential.

Keywords: artificial intelligence, machine learning, materials science, inverse design, materials discovery

Riassunto

Individuare materiali con proprietà specifiche è un compito complesso. Tradizionalmente, questa attività ha richiesto ripetuti cicli di formulazione, sintesi e verifica per individuare una soluzione adeguata. Negli ultimi anni, l'intelligenza artificiale, in particolare l'apprendimento automatico, l'apprendimento profondo e i modelli generativi, ha iniziato a modificare questo processo. Questi strumenti consentono di analizzare grandi quantità di informazioni, stimare le proprietà e proporre nuove composizioni o strutture. L'articolo esamina quindici pubblicazioni scientifiche selezionate per descrivere le applicazioni dell'intelligenza artificiale alla scoperta e alla progettazione dei materiali, i suoi principali contributi e le difficoltà ancora da affrontare. La revisione è articolata in cinque temi: gestione dei dati e informatica dei materiali, previsione delle relazioni tra composizione, struttura e proprietà, progettazione inversa e generazione di candidati, supporto alla sintesi e alla caratterizzazione, e laboratori autonomi. Gli studi presentano esempi riguardanti leghe, comprese le leghe refrattarie ad alta entropia, materiali bidimensionali, catalizzatori, strutture metallo-organiche, materiali porosi, materiali piezoelettrici, metamateriali, polimeri e materiali elettrochimici per batterie e protezione dalla corrosione. L'integrazione dei modelli di intelligenza artificiale con principi fisici può accelerare le previsioni e facilitarne l'interpretazione. Restano aperte questioni relative alla qualità dei dati, alla previsione per materiali poco conosciuti, alla validazione sperimentale e alle risorse di calcolo necessarie. L'intelligenza artificiale aiuta i ricercatori a scegliere le ipotesi da studiare e gli esperimenti da condurre. Le prove di laboratorio restano essenziali.

Parole chiave: intelligenza artificiale, apprendimento automatico, scienza dei materiali, progettazione inversa, scoperta di materiali

1. Introducción

Los materiales están presentes en diferentes aspectos de nuestra vida diaria y son fundamentales en áreas como la electrónica, el transporte, la medicina, la energía y la construcción. Sus

características dependen de factores como la composición química, la estructura interna y los procesos de fabricación. Por esta razón, desarrollar materiales con propiedades específicas es una tarea importante para la ciencia y la ingeniería.

Tradicionalmente, el descubrimiento de nuevos materiales se ha basado en la experiencia de los investigadores y en métodos de ensayo y error. Aunque este enfoque ha permitido obtener resultados importantes, también requiere tiempo, recursos y numerosos experimentos. Esta dificultad aumenta cuando se busca mejorar varias propiedades al mismo tiempo, como la resistencia mecánica, la conductividad, la estabilidad térmica y el costo. Klenam et al., (2023) explican que el diseño de aleaciones implica optimizar diferentes propiedades, lo que representa un desafío para los métodos tradicionales.

Ante esta situación, la inteligencia artificial se ha convertido en una herramienta de apoyo para el descubrimiento y diseño de materiales. Mediante técnicas como el aprendizaje automático y el aprendizaje profundo, es posible analizar grandes cantidades de información, identificar relaciones entre la composición, la estructura, las propiedades, y predecir el comportamiento de materiales que todavía no han sido fabricados. Además, los modelos generativos pueden proponer nuevas composiciones y estructuras según las características que se desean obtener (Badini et al., 2023).

El uso de estas tecnologías ha crecido en los últimos años debido a los avances computacionales y a la disponibilidad de bases de datos científicas. Jain (2024) destaca el aumento de las investigaciones que utilizan aprendizaje automático en la ciencia de materiales, mientras que Zivic et al. (2025) recalca la importancia de contar con información organizada y herramientas que permitan compartir datos de manera confiable. Sin embargo, todavía existen dificultades relacionadas con la calidad de los datos, la precisión de las predicciones y la posibilidad de fabricar los materiales propuestos. Por ello, la validación experimental sigue siendo necesaria para comprobar los resultados obtenidos mediante la inteligencia artificial (Otyepka et al., 2025).

En este contexto, el presente artículo tiene como objetivo analizar las aplicaciones de la inteligencia artificial en el descubrimiento y diseño de nuevos materiales, considerando las técnicas utilizadas, sus principales campos de aplicación, sus beneficios y sus limitaciones.

2. Metodología

Para desarrollar este artículo se realizó una revisión documental narrativa de quince publicaciones científicas proporcionadas como material de consulta, publicadas entre 2023 y 2026. Los documentos incluyen revisiones, investigaciones, estudios de caso y artículos de divulgación científica relacionados con la inteligencia artificial y su aplicación en el descubrimiento y diseño de materiales. También se consideraron trabajos sobre la predicción de propiedades térmicas y mecánicas, el análisis de microestructuras, los materiales compuestos, la producción de celulosa

bacteriana, el modelado de polímeros con intervención de expertos, el diseño de aleaciones refractarias de alta entropía y la electroquímica asistida por inteligencia artificial.

Una vez recopilada la información, se revisó cada publicación para identificar sus objetivos, las técnicas de inteligencia artificial utilizadas, los materiales estudiados, sus principales aplicaciones y las limitaciones encontradas. Para facilitar el análisis, la información se organizó en cinco temas principales: informática y gestión de datos, predicción de propiedades, diseño inverso de materiales, apoyo a los procesos de síntesis y caracterización, y automatización de experimentos.

Los cinco temas establecidos constituyen la organización principal de la revisión, mientras que los apartados sobre procesamiento del lenguaje natural, materiales electroquímicos, aplicaciones en diferentes familias de materiales y validación se desarrollan como subtemas complementarios. Estos permiten presentar casos específicos de aplicación de la inteligencia artificial y relacionarlos con los ejes principales, sin constituir categorías independientes de la metodología.

La selección de los documentos se realizó considerando su relación directa con el tema de investigación, principalmente aquellos que abordaban el uso de inteligencia artificial en la predicción de propiedades, diseño de materiales, optimización de composiciones, síntesis y caracterización. También se tomaron en cuenta los aportes de cada publicación para comprender las aplicaciones, ventajas y limitaciones de estas herramientas en diferentes familias de materiales. Debido a que los documentos fueron proporcionados previamente, la revisión se limitó al material disponible para el análisis.

Esta investigación tiene un enfoque documental y narrativo, por lo que no corresponde a un metaanálisis ni a una revisión sistemática basada en el protocolo PRISMA. Los documentos utilizados fueron entregados previamente y no se contó con un registro completo de las búsquedas realizadas en bases de datos ni de los procesos de selección de publicaciones. Por esta razón, el análisis se limita a la información disponible en las fuentes consultadas y no pretende representar la totalidad de las investigaciones existentes sobre el tema.

3. Resultados

Informática de materiales y técnicas de inteligencia artificial

Los estudios revisados muestran que la inteligencia artificial necesita datos confiables para obtener resultados útiles. Esta información incluye la composición, estructura, condiciones de fabricación y propiedades de los materiales. Entre las plataformas utilizadas para consultar estos datos se encuentran Materials Project, OQMD, NOMAD y AFLOW, que permiten organizar información y comparar diferentes materiales (Cao et al., 2026).

Research Club Scientia Vol. 4, No 4, Octubre - Diciembre, pp. 1662-1677, ISSN: 3103 – 1315

Entre las técnicas más utilizadas están los métodos clásicos de aprendizaje automático, como los bosques aleatorios y las máquinas de soporte vectorial, además de las redes neuronales gráficas y los modelos generativos. Jain (2024) señala que las redes neuronales gráficas lograron reducir aproximadamente siete veces el error de predicción de la entalpía de formación frente a métodos convencionales en la comparación realizada. También se destaca la inteligencia artificial explicable, que busca identificar qué características influyen en las predicciones (Otyepka et al., 2025).

Predicción de propiedades y selección de materiales

Una de las principales aplicaciones de la inteligencia artificial es estimar las propiedades de un material antes de fabricarlo. Entre las características que se pueden analizar están la estabilidad, la energía de formación, la conductividad, la respuesta mecánica y el comportamiento magnético.

Una estrategia utilizada es combinar el aprendizaje automático con la teoría del funcional de la densidad (DFT). Esta combinación permite aprovechar los resultados de cálculos físicos para entrenar modelos que realicen estimaciones con menor costo computacional. Sin embargo, como señalan Klenam et al. (2023), la falta de datos experimentales y la incertidumbre pueden provocar errores, por lo que las predicciones necesitan comprobarse.

En los polímeros, Cravero et al. (2023) describen una metodología híbrida que integra el aprendizaje automático con la intervención de un experto en materiales (Expert-in-the-Loop) para predecir el índice de refracción y propiedades mecánicas derivadas del ensayo de tracción. Los modelos se desarrollaron con conjuntos de 227 polímeros para el índice de refracción y 77 para las propiedades mecánicas, y sirven como una prueba virtual para estimar propiedades antes de la síntesis.

Diseño inverso y generación de nuevos materiales

El diseño inverso permite partir de una propiedad deseada y buscar composiciones o estructuras que puedan cumplirla. Esta estrategia facilita la selección de materiales según las necesidades de una aplicación específica.

Cao et al. (2026) reportan la identificación computacional de 2,2 millones de estructuras candidatas dentro de los criterios de estabilidad considerados en su estudio. Este resultado corresponde a la exploración y selección de materiales mediante herramientas computacionales, por lo que no representa la cantidad de materiales sintetizados experimentalmente. Por otro lado, Zivic et al. (2025) presentan aplicaciones del diseño inverso en metamateriales fabricados mediante impresión 3D, donde la geometría se modifica para conseguir determinadas respuestas mecánicas. Estos resultados muestran la capacidad de la inteligencia artificial para explorar distintas posibilidades, aunque todavía es necesario comprobar si los materiales pueden fabricarse.

En el diseño de aleaciones refractarias de alta entropía, Román Sedano et al. (2026) explican que, con solo ocho elementos metálicos refractarios, pueden generarse más de 65 millones de combinaciones, por lo que fabricar y evaluar una por día tomaría más de 178 mil años. Para enfrentar este problema, proponen usar primero un algoritmo evolutivo multiobjetivo (NSGA-II), que propone composiciones que equilibran propiedades como la resistencia y la estabilidad térmica, y después una red neuronal artificial que predice la dureza, la temperatura de fusión y la tendencia a formar fases secundarias. Las composiciones seleccionadas se fabrican y se validan experimentalmente.

Procesamiento del lenguaje natural (PLN) y modelos de lenguaje

El procesamiento del lenguaje natural permite obtener información de artículos científicos, como composiciones, temperaturas, condiciones de síntesis y propiedades. Jiang et al. (2025) explican que estas herramientas pueden identificar materiales, reconocer relaciones entre variables y organizar información que se encuentra dispersa en diferentes publicaciones.

Síntesis, caracterización y laboratorios autónomos

La inteligencia artificial también puede apoyar la fabricación y evaluación de nuevos materiales mediante la selección de condiciones de síntesis, el ajuste de temperaturas y tiempos, y el análisis de imágenes y espectros. Estas aplicaciones permiten reducir algunas tareas repetitivas y facilitar el seguimiento de los experimentos (Otyepka et al., 2025).

Una aplicación importante son los laboratorios autónomos, que utilizan algoritmos y equipos automatizados para realizar experimentos y ajustar las siguientes pruebas según los resultados obtenidos. Cao et al. (2026) reportan un laboratorio que consiguió 41 compuestos novedosos a partir de 58 objetivos durante más de 17 días de funcionamiento continuo. A diferencia de la generación computacional de estructuras candidatas, este resultado corresponde a la obtención de compuestos mediante un proceso experimental automatizado. Este caso demuestra las posibilidades de la automatización, aunque todavía requiere supervisión, mantenimiento y medidas de seguridad.

Aplicaciones en materiales térmicos, compuestos y biomateriales

Los estudios complementarios muestran que la inteligencia artificial puede utilizarse en diferentes tipos de materiales. Purcell et al. (2023) desarrollaron un modelo para estimar la conductividad térmica utilizando 75 valores experimentales. Posteriormente, analizaron 732 materiales e identificaron 80 candidatos con características favorables para el aislamiento térmico.

En materiales compuestos, Machado et al. (2025) utilizaron una red neuronal para estimar propiedades elásticas mediante imágenes microestructurales. Entrenaron el modelo con 10 000 imágenes sintéticas y evaluaron 2 000 casos. Mientras que el cálculo mediante elementos finitos

tomó cerca de 14 horas, la red realizó las estimaciones en aproximadamente 34 segundos. Estos resultados muestran la posibilidad de utilizar inteligencia artificial para reducir el tiempo necesario en la estimación de propiedades de materiales compuestos.

También se identificó la aplicación de inteligencia artificial en la producción de celulosa bacteriana. Martínez (2025) plantea el uso de modelos predictivos y sistemas de control para ajustar condiciones como la temperatura, el pH, los nutrientes y el oxígeno durante la fermentación. Esto puede contribuir a mejorar la uniformidad de la producción y reducir desperdicios.

Materiales electroquímicos y almacenamiento de energía

Benito Santiago et al. (2026) revisan cómo se aplica la inteligencia artificial en la electroquímica, base de tecnologías como las baterías recargables, los electrolizadores para producir hidrógeno verde y los sistemas de protección contra la corrosión. En una búsqueda en Scopus para el periodo 2021–2026, los autores contabilizaron 6861 publicaciones sobre baterías y almacenamiento de energía, 1814 sobre corrosión, 908 sobre catálisis electroquímica, 72 sobre laboratorios autónomos y 5 sobre reacciones electroorgánicas. Con estas cifras, indican que los laboratorios autónomos y las reacciones electroorgánicas son áreas emergentes con amplio margen de crecimiento.

En baterías, señalan que las redes neuronales profundas permiten predecir voltajes, capacidades de almacenamiento y cambios de volumen sin simular cada material candidato. En catálisis, mencionan el Open Catalyst Project, que reunió más de un millón de estructuras para entrenar redes neuronales que predicen las interacciones entre superficies catalíticas y moléculas adsorbidas. En corrosión, los modelos relacionan la composición química, las condiciones ambientales y las variables electroquímicas para estimar tasas de degradación antes de realizar ensayos prolongados, aunque su precisión depende de contar con datos experimentales confiables y estandarizados.

Comparación de los métodos y necesidad de validación

La comparación de los estudios permite observar que no existe un único método adecuado para todos los materiales. Los modelos analíticos ofrecen estimaciones rápidas, las simulaciones numéricas permiten estudiar fenómenos más complejos y la inteligencia artificial facilita el análisis de grandes cantidades de datos.

Por esta razón, combinar diferentes métodos puede ofrecer mejores resultados. Sin embargo, las predicciones deben comprobarse mediante experimentos para conocer si el material realmente cumple con las propiedades esperadas. La calidad de los datos, las condiciones de fabricación y la posibilidad de reproducir los resultados siguen siendo factores importantes para aplicar estas tecnologías en situaciones reales.

TABLA 1

Comparación de las publicaciones científicas revisadas

Estudio	Enfoque	Aporte principal
Badini et al. (2023)	IA en materiales	Predicción y diseño
Klenam et al. (2023)	Metalurgia y datos	Optimización de aleaciones
Jain (2024)	Machine learning	Avances y limitaciones
Bai & Zhang (2025)	IA y materiales	Innovación sostenible
Jiang et al. (2025)	Procesamiento del lenguaje natural (PLN) y modelos de lenguaje	Extracción de información
Otyepka et al. (2025)	IA en materiales	Diseño y síntesis
Zivic et al. (2025)	Informática de materiales	Herramientas y aplicaciones
Cao et al. (2026)	Descubrimiento de materiales	Predicción y automatización
Purcell et al. (2023)	Conductividad térmica	Selección de aislantes
Tellez Ruíz (2025)	Machine learning en fármacos	Descubrimiento de fármacos
Machado et al. (2025)	Redes neuronales	Predicción de propiedades
Martínez (2025)	IA en biomateriales	Optimización de producción
Cravero et al. (2023)	ML y expertos	Predicción de polímeros
Benito Santiago et al. (2026)	IA en electroquímica	Baterías y corrosión
Román Sedano et al. (2026)	IA en aleaciones	Diseño de aleaciones

Elaboración propia

En la Tabla 1 resume el tema principal y el aporte de cada uno de los quince documentos revisados, no pretende clasificar toda la producción científica.

TABLA 2

Usos de la inteligencia artificial en diferentes familias de materiales.

Familia o sistema	Uso de IA	Aspecto que debe validarse	Fuente
Aleaciones	Optimización de composición	Resistencia y estabilidad	Klenam et al. (2023); Román Sedano et al. (2026)
Materiales 2D	Predicción de propiedades	Síntesis y funcionamiento	Badini et al. (2023)
Catalizadores	Selección de sitios activos	Actividad y estabilidad	Badini et al. (2023); Benito Santiago et al. (2026)
Estructuras metal-orgánicas (MOF) y porosos	Predicción de adsorción	Capacidad y regeneración	Zivic et al. (2025)
Fluoruro de polivinilideno (PVDF)	Predicción piezoeléctrica	Respuesta eléctrica	Zivic et al. (2025)
Metamateriales	Diseño de geometrías	Resistencia mecánica	Zivic et al. (2025)
Compuestos	Análisis microestructural	Ensayos mecánicos	Machado et al. (2025)
Celulosa bacteriana	Optimización de cultivo	Calidad y rendimiento	Martínez (2025)

Familia o sistema	Uso de IA	Aspecto que debe validarse	Fuente
Aleaciones de alta entropía	Diseño de composiciones	Dureza y estabilidad térmica	Román Sedano et al. (2026)
Polímeros	Predicción de propiedades	Datos experimentales	Cravero et al. (2023)
Materiales electroquímicos	Predicción de desempeño	Pruebas electroquímicas	Benito Santiago et al. (2026)

Elaboración propia en base de (Badini et al., 2023; Benito Santiago et al., 2026; Cravero et al., 2023; Klenam et al., 2023; Machado et al., 2025; Martínez, 2025; Román Sedano et al., 2026; Zivic et al., 2025).

En la Tabla 2 presenta algunas de las familias de materiales en las que se aplica la inteligencia artificial, mostrando cómo ayuda a optimizar su diseño y predecir sus propiedades.

4. Discusión

A partir de los estudios revisados, se puede observar que la inteligencia artificial no busca reemplazar los métodos de laboratorio, sino facilitar el trabajo de los investigadores al momento de decidir qué materiales vale la pena estudiar. Mientras que los métodos tradicionales permiten evaluar una cantidad limitada de opciones, las herramientas computacionales pueden analizar muchas más composiciones y estructuras en menos tiempo.

Jain (2024) señala que las investigaciones que utilizan aprendizaje automático en la ciencia de materiales han aumentado aproximadamente 1,67 veces por año. Este crecimiento demuestra el interés que existe por aplicar estas tecnologías en el área. Sin embargo, el autor también indica que los métodos tradicionales de aprendizaje automático siguen siendo muy utilizados.

También se observa que la inteligencia artificial puede ofrecer mejores resultados cuando se combina con conocimientos de física y química. Los algoritmos permiten analizar grandes cantidades de información y encontrar relaciones entre diferentes variables, mientras que los principios físicos ayudan a comprobar si las predicciones tienen sentido. Zivic et al. (2025) explican que los métodos tradicionales suelen ser más fáciles de interpretar, mientras que los modelos basados en inteligencia artificial pueden reconocer relaciones complejas con mayor rapidez. Por esta razón, los enfoques que combinan ambos métodos representan una alternativa interesante para el desarrollo de materiales.

Cravero et al. (2023) ofrecen un ejemplo concreto de esta combinación en el campo de los polímeros. Al comparar un enfoque de "caja negra", en el que el algoritmo selecciona automáticamente los descriptores moleculares, con otro en el que el experto en materiales los preselecciona, los autores observaron que el segundo produjo modelos mucho más compactos: 5 descriptores frente a 21 para el índice de refracción y 4 frente a 11 para el aspecto dúctil. En el índice de refracción, el coeficiente de determinación (R^2) pasó de 0,9686 a 0,8987, mientras que en el aspecto dúctil la métrica se mantuvo igual (88,46 %CC). Los autores consideran aceptable esa diferencia porque los modelos resultan más interpretables y, por tanto, más confiables para los diseñadores de materiales que no son expertos en aprendizaje automático.

A pesar de sus ventajas, uno de los problemas que todavía presenta la inteligencia artificial es la dificultad para predecir correctamente el comportamiento de materiales que no se parecen a los utilizados durante su entrenamiento. Un modelo puede funcionar bien con composiciones conocidas, pero cometer errores cuando se encuentra con estructuras nuevas o condiciones diferentes. Klenam et al. (2023) advierten que pueden aparecer falsos positivos y estimaciones que no corresponden con el comportamiento real del material. Por ello, es importante revisar la incertidumbre de las predicciones y comprobar los resultados mediante pruebas experimentales.

Esta dificultad se relaciona con la calidad de los datos. Benito Santiago et al. (2026) señalan que los datos electroquímicos suelen ser heterogéneos, porque cada laboratorio utiliza protocolos distintos y algunos conjuntos contienen errores o valores atípicos que pueden empeorar el desempeño de los modelos. También describen el problema de la generalización de materiales, es decir, la dificultad de extrapolar hacia composiciones diferentes de las usadas en el entrenamiento, y advierten que las redes neuronales profundas suelen funcionar como "cajas negras" que no explican los mecanismos fisicoquímicos detrás de sus predicciones.

Además, los resultados de los experimentos que no salen como se esperaba también pueden aportar información importante. Por ejemplo, cuando una composición no alcanza la propiedad deseada, ese resultado puede ayudar a descartar alternativas y mejorar futuras investigaciones. Si las bases de datos solamente incluyen experimentos exitosos, los modelos no tendrán una visión completa de lo que ocurre durante el desarrollo de un material. Sobre este punto, Otyepka et al. (2025) destacan la importancia de conservar también los resultados negativos y mantener la información organizada para que pueda aprovecharse en otros estudios.

En cuanto a la fabricación de materiales, los laboratorios autónomos representan un avance importante porque permiten que los experimentos se ajusten según los resultados obtenidos. Cao et al. (2026) presentan un caso en el que se consiguieron 41 compuestos novedosos a partir de 58 objetivos durante más de 17 días de funcionamiento. Este ejemplo demuestra las posibilidades de combinar inteligencia artificial con equipos automatizados. No obstante, implementar este tipo de

laboratorios requiere inversión económica, mantenimiento, medidas de seguridad y personal capacitado para supervisar los procesos.

Benito Santiago et al. (2026) añaden que, en electroquímica, todavía existen limitaciones para incorporar técnicas electroquímicas avanzadas en estos laboratorios. Aun así, la tendencia que describen es que el investigador se concentre en formular preguntas, interpretar resultados y diseñar nuevas estrategias, y no en ejecutar manualmente cada etapa del experimento. Además, su búsqueda en Scopus ubica a los laboratorios autónomos como un área emergente: se encontraron 72 publicaciones, frente a 6861 sobre baterías y almacenamiento de energía.

Los estudios de Zivic et al. (2025) también muestran que la IA puede aplicarse a diferentes familias de materiales, como los MOF, los materiales piezoeléctricos y los metamateriales. En los MOF, se analiza la relación entre su estructura porosa y la capacidad de adsorber o separar gases. En los materiales piezoeléctricos, interesa estudiar cómo responden eléctricamente cuando reciben una fuerza mecánica. Por otro lado, en los metamateriales se puede modificar la geometría para conseguir determinadas respuestas mecánicas. Estos ejemplos muestran que cada material necesita modelos y variables adecuados a sus características.

La sostenibilidad es otro aspecto que debe tomarse en cuenta. Aunque la inteligencia artificial permite acelerar la búsqueda de nuevos materiales, eso no significa que todo el proceso sea necesariamente beneficioso para el ambiente. Los cálculos computacionales, el entrenamiento de modelos y los equipos automatizados también consumen energía y recursos. Además, es necesario analizar la disponibilidad de las materias primas, la posible toxicidad, la capacidad de reciclaje, la durabilidad y los costos de fabricación. Bai & Zhang (2025) relacionan el desarrollo de nuevos materiales con necesidades ambientales, energéticas y biomédicas. De igual manera, Otyepka et al. (2025) destacan la importancia de considerar el consumo energético y los costos antes de llevar estas tecnologías a la práctica.

El trabajo de Machado et al. (2025) permiten observar una ventaja práctica de la IA en el estudio de materiales compuestos. Una vez entrenados, los modelos pueden estimar algunas propiedades en mucho menos tiempo que determinadas simulaciones numéricas. Sin embargo, esta rapidez no significa que puedan utilizarse para cualquier tipo de material sin realizar nuevas comprobaciones. Cambios en las fibras, la matriz o la distribución de los componentes pueden afectar los resultados, especialmente cuando esas condiciones no fueron consideradas durante el entrenamiento.

Vacíos de conocimiento y perspectivas futuras

Datos incompletos y falta de estandarización

Todavía existen diferencias en la manera de registrar las composiciones, las condiciones de síntesis, las unidades y los métodos de caracterización. Cuando faltan datos adicionales sobre cómo

se realizó un experimento, resulta más difícil comparar estudios y combinar información de distintos repositorios. Por ello, es necesario avanzar hacia formatos comunes, registrar la incertidumbre y conservar tanto los resultados positivos como los negativos.

Generalización y cuantificación de incertidumbre

Los modelos deberían poder reconocer cuándo una predicción está fuera de las condiciones en las que se puede confiar en ella. Para reducir este problema se pueden reportar intervalos de confianza, probar los modelos con conjuntos de datos externos y seleccionar nuevos experimentos que aporten información útil. La incertidumbre debe tomarse en cuenta al decidir qué experimento realizar, y no aparecer solamente como un dato estadístico al final del análisis.

Interpretabilidad y conocimiento físico

Es importante que las herramientas de inteligencia artificial explicable permitan identificar qué variables influyen en una predicción y comprobar si esas relaciones coinciden con los mecanismos físicos conocidos. Una posibilidad es incorporar leyes físicas, condiciones termodinámicas y conocimientos de química desde el entrenamiento del modelo, en vez de utilizarlos únicamente al revisar los resultados.

Integración entre diseño, síntesis y caracterización

En muchos proyectos, la predicción por computadora, la fabricación del material y la medición de sus propiedades se realizan por separado. Una línea de trabajo para el futuro es conectar mejor estas etapas, de modo que los resultados del laboratorio sirvan para actualizar los modelos y que las predicciones tengan en cuenta las limitaciones reales de fabricación.

Validación a escala y transferencia industrial.

Que un material funcione en el laboratorio no significa que tendrá el mismo desempeño cuando se produzca a gran escala. Para dar ese paso se necesitan estudios sobre reproducibilidad, escalabilidad, envejecimiento, estabilidad y costos a lo largo de su vida útil. También conviene incluir evaluaciones económicas y ambientales, para evitar que la búsqueda se quede en materiales interesantes desde el punto de vista computacional, pero difíciles o inviables de fabricar.

5. Conclusiones

La inteligencia artificial está cambiando la manera de descubrir y diseñar materiales porque permite analizar información compleja, estimar propiedades, explorar composiciones y estructuras que serían difíciles de revisar mediante el ensayo y error tradicional. Su aporte aparece en varias etapas del proceso: desde la organización de datos y el estudio de las relaciones entre composición,

estructura y propiedades, hasta el diseño inverso, la planificación de la síntesis, la caracterización y la automatización de experimentos.

Los métodos clásicos de aprendizaje automático siguen siendo útiles, mientras que las redes neuronales gráficas y los modelos generativos ofrecen nuevas formas de representar y explorar materiales. Una de las opciones más prometedoras es combinar estas técnicas con cálculos físicos y conocimientos científicos. De esta manera se puede acelerar el análisis sin perder por completo la posibilidad de entender por qué el modelo llega a determinado resultado.

Los casos revisados incluyen aleaciones (entre ellas, las refractarias de alta entropía), polímeros, materiales electroquímicos para baterías y protección contra la corrosión, materiales porosos, MOF, materiales piezoeléctricos, catalizadores, materiales bidimensionales y metamateriales. Esta variedad demuestra que no existe un algoritmo que sirva de la misma manera para todos los problemas. Cada familia de materiales requiere datos, descriptores y pruebas de validación que tengan en cuenta sus características físicas y químicas.

Entre las principales dificultades están la calidad de los datos, la capacidad de los modelos para trabajar con materiales nuevos, la incertidumbre de las predicciones, la falta de resultados experimentales y la diferencia entre las condiciones del laboratorio y las de fabricación real. Por esta razón, los resultados de la inteligencia artificial deben entenderse como predicciones que necesitan comprobarse, no como respuestas definitivas.

Para que esta área siga avanzando de forma responsable, será necesario mejorar las bases de datos abiertas, registrar también los experimentos que no tuvieron éxito, desarrollar modelos más fáciles de interpretar y evaluar el consumo de energía. También será importante fortalecer la colaboración entre especialistas en ciencia de materiales, informática, química, física e ingeniería. La inteligencia artificial puede acelerar la innovación, pero su aporte más valioso está en ayudar a plantear mejores preguntas, elegir experimentos adecuados y convertir las propuestas de la computadora en materiales útiles, seguros y sostenibles.

Referencias Bibliográficas

Badini, S., Regondi, S., & Pugliese, R. (2023). Unleashing the Power of Artificial Intelligence in Materials Design. *Materials*, *16*(17), 5927. https://doi.org/10.3390/ma16175927

Bai, X., & Zhang, X. (2025). Artificial Intelligence-Powered Materials Science. *Nano-Micro Letters*, *17*(1), 135. https://doi.org/10.1007/s40820-024-01634-8

Benito Santiago, S. E., Reyes Valdez, J. J., Morales Zamudio, L., Lozano Ramírez, T., Lozano Ramírez, L. D. R., & Corona Aguilar, J. G. (2026). Electroquímica e Inteligencia Artificial:

La Nueva Revolución en el Diseño de Materiales. *Tendencias en energías renovables y sustentabilidad*, *5*(2), 351-358. https://doi.org/10.56845/terys.v5i2.744

Cao, Y., Fu, H., Lu, J., Chen, Y., Jing, T., Fan, X., & Xu, B. (2026). Artificial Intelligence Empowered New Materials: Discovery, Synthesis, Prediction to Validation. *Nano-Micro Letters*, *18*(1), 109. https://doi.org/10.1007/s40820-025-01945-4

Cravero, F., Ponzoni, I., & Diaz, M. F. (2023). Improving predictive modeling of polymeric materials using a hybrid approach of machine learning and expert intervention. *Proceedings of the 21th LACCEI International Multi-Conference for Engineering, Education and Technology (LACCEI 2023): "Leadership in Education and Innovation in Engineering in the Framework of Global Transformations: Integration and Alliances for Integral Development"*. 21st LACCEI International Multi-Conference for Engineering, Education and Technology (LACCEI 2023): "Leadership in Education and Innovation in Engineering in the Framework of Global Transformations: Integration and Alliances for Integral Development". https://doi.org/10.18687/LACCEI2023.1.1.1572

Jain, A. (2024). Machine learning in materials research: Developments over the last decade and challenges for the future. *Current Opinion in Solid State and Materials Science*, *33*, 101189. https://doi.org/10.1016/j.cossms.2024.101189

Jiang, X., Wang, W., Tian, S., Wang, H., Lookman, T., & Su, Y. (2025). Applications of natural language processing and large language models in materials discovery. *Npj Computational Materials*, *11*(1), 79. https://doi.org/10.1038/s41524-025-01554-0

Klenam, D. E. P., Asumadu, T. K., Vandadi, M., Rahbar, N., McBagonluri, F., & Soboyejo, W. O. (2023). Data science and material informatics in physical metallurgy and material science: An overview of milestones and limitations. *Results in Materials*, *19*, 100455. https://doi.org/10.1016/j.rinma.2023.100455

Machado, B. B., García, D. I., Moya, A. R. Q., Tarancón, J. E., & Giner, E. (2025). Estimación de las constantes elásticas en láminas unidireccionales a través de imágenes microestructurales y machine learning. *Anales de Ingeniería Mecánica*, *1*(24). https://doi.org/10.63450/aim.1.198.2025

Martínez, P. R. (2025). La Inteligencia Artificial como aliada en el proceso creativo: Un estudio de caso con celulosa bacteriana como biomaterial para el diseño. *Cuadernos del Centro de Estudios de Diseño y Comunicación*, (256). https://doi.org/10.18682/cdc.vi256.12190

Otyepka, M., Pykal, M., & Otyepka, M. (2025). Advancing materials discovery through artificial intelligence. *Applied Materials Today*, *47*, 102981. https://doi.org/10.1016/j.apmt.2025.102981

Purcell, T. A. R., Scheffler, M., Ghiringhelli, L. M., & Carbogno, C. (2023). Accelerating materials-space exploration for thermal insulators by mapping materials properties via artificial intelligence. *Npj Computational Materials*, *9*(1), 112. https://doi.org/10.1038/s41524-023-01063-y

Román Sedano, A. M., González Reyes, J. G., Figueroa Vargas, I. A., & Hernández Mecinas, E. (2026). Materiales del futuro: La inteligencia artificial impulsando el diseño de aleaciones de alta entropía. *Materiales Avanzados*, (8), 39-45. https://doi.org/10.22201/iim.rma.2026.8.171

Tellez Ruíz, D. G. (2025). *Machine Learning en el diseño racional de fármacos: Nuevos avances en el descubrimiento de fármacos (2000-2024)*. https://hdl.handle.net/20.500.12495/14417

Zivic, F., Malisic, A. K., Grujovic, N., Stojanovic, B., & Ivanovic, M. (2025). Materials informatics: A review of AI and machine learning tools, platforms, data repositories, and applications to architectured porous materials. *Materials Today Communications*, *48*, 113525. https://doi.org/10.1016/j.mtcomm.2025.113525