

DEL EDITOR

EL DISEÑO Y MODELAMIENTO DE MATERIALES

ASDRÚBAL VALENCIA GIRALDO

Grupo de Investigaciones Pirometalúrgicas y de Materiales, Universidad de Antioquia, avalen@udea.edu.co

1. INTRODUCCIÓN

Durante milenios el hombre utilizó los materiales como los encontraba en la naturaleza o con pequeñas modificaciones; esto fue superado cuando desarrolló la alfarería, pues los cacharros cerámicos fueron los primeros productos de materiales artificiales; en efecto, estos utensilios, hechos a partir de tierra, agua y fuego, fueron el resultado de transformaciones de fase controladas; luego desarrolló las aleaciones, con el bronce, y desde entonces no cesó de mejorar los materiales. En resumen, el hombre primero utilizó los materiales, después los manipuló para mejorarlos y por último aprendió a diseñarlos expresamente para las necesidades específicas.

El objetivo de la ciencia y tecnología de materiales de hoy en día es el diseño de materiales a la medida (empezando por su composición, fases constituyentes y microestructura), con el fin de obtener un material con unas propiedades adecuadas para una aplicación determinada. Por lo anterior se puede decir que una de las características fundamentales de la actual ingeniería de materiales es que, de la mano de la ciencia de los materiales, desarrolla, de acuerdo con las demandas expresas, los materiales más adecuados para éstas. Este desarrollo implica, obviamente el diseño –y por ende el modelamiento– y tal es el tema que se desarrollará en este artículo.

Sin embargo, la comprensión de la correlación entre la estructura de los materiales y sus propiedades es la clave en el diseño de nuevos materiales con las propiedades deseadas, por esta razón, se deben introducir algunas nociones de lo que se entiende por material, por propiedades y por estructura.

2. MATERIALES

Un material es simplemente la materia puesta en uso. Un material tecnológico es cualquier sustancia o compuesto, natural o artificial, que tenga un potencial de uso por el hombre. Un material de ingeniería es un material tecnológico pero generalmente sólido, que puede ser utilizado en la fabricación de herramientas, edificios, vías o cualquiera de las piezas de una máquina. También es un material de ingeniería el que ha recibido una componente importante de tecnología ingenieril en su diseño o procesamiento y tiene un uso no estructural. Desde este punto de vista los materiales de ingeniería pueden ser estructurales o funcionales. Así se habla de grandes familias de materiales semiconductores, superconductores, magnéticos, catalizadores y biomateriales.

Por su pertenencia a uno u otro tipo dentro de la química inorgánica u orgánica, los materiales se pueden dividir en metálicos, poliméricos, cerámicos y compuestos. Su origen puede ser mineral, vegetal o animal. Normalmente los materiales poliméricos se dividen en plásticos y elastómeros y los cerámicos en cristalinos y vítreos.

Desde la edad de bronce hasta bien avanzado el siglo XX, los materiales metálicos ocuparon un amplio espectro dentro de los utilizados en la ingeniería. Luego, otros han venido sustituyendo a aquéllos en ciertos usos específicos, en particular los poliméricos, los compuestos y, en cierta medida, los cerámicos. Los metales siguen siendo importantes por su disponibilidad y características. La evolución de los materiales ha llevado al cambio de paradigmas en este campo, como se quiere reflejar en la tabla 1.

Tabla 1. Paradigmas

Anteriores	Actuales
-Los materiales se producen en la naturaleza	- Hay materiales artificiales
-Aleaciones básicas	- Materiales ingenieriles
-El investigador buscaba entender los materiales ya existentes	- El investigador sintetiza materiales que no se producen en la naturaleza

Sin embargo, el desarrollo de nuevos materiales va dejando obsoletas las clasificaciones tradicionales de los materiales en cerámicos, metales, polímeros, materiales compuestos, biomateriales, semiconductores, superconductores, materiales magnéticos y catalizadores. El futuro está en el mestizaje.

Así, los nuevos materiales con que se convivirá cotidianamente durante el siglo XXI se desarrollarán a partir de materiales ordinarios (cerámicos, metales, polímeros, materiales compuestos y biomateriales) y tendrán tres adjetivos principales: serán nanomateriales, materiales inteligentes y materiales biomiméticos.¹

La habilidad para controlar, manipular y diseñar materiales en la escala de tamaños nanométrica (10^{-9} m), nanomateriales, será uno de los motores conductores de los avances tecnológicos del siglo XXI. Los materiales inteligentes revolucionarán la forma de concebir la síntesis de materiales: al estar diseñados para responder a estímulos externos, extender su vida útil, ahorrar energía o simplemente ajustarse para ser más confortables al ser humano. El desarrollo de materiales inteligentes los hará auto-replicantes, auto-reparables e, incluso, si es necesario, auto-destructibles, reduciéndose con ello los residuos y aumentando su eficiencia. Los materiales biomiméticos buscan replicar o mimetizar los procesos y materiales biológicos, tanto orgánicos como inorgánicos.

La biomimética es el diseño de sistemas, materiales, y su funcionalidad para imitar la naturaleza, ejemplos corrientes son los materiales en capas para lograr la dureza del caparazón del abalón (oreja marina) o tratar de entender por qué la tela de araña es más resistente que el acero. Conocer mejor los procesos utilizados por los organismos vivos para sintetizar minerales y materiales compuestos servirá, por ejemplo, para desarrollar

materiales ultra-duros y, a la vez, ultraligeros para las aeronaves.^{2,3}

3. PROPIEDADES

De todas las características de los materiales se deben tener en cuenta aquellas de las cuales depende su utilidad. Dichas características son unas veces cualidades y otras veces defectos y en algunos casos sólo constantes físicas. Se pueden clasificar en varios grupos, según sus propiedades físicas, químicas, mecánicas, tecnológicas y dimensionales.

Ya se señaló que por sus propiedades los materiales se pueden dividir en funcionales y estructurales. Son funcionales los que se utilizan por sus propiedades físicas y químicas, es decir por las funciones que desempeñan frente a distintos campos (ópticos, térmicos, magnéticos, eléctricos) o frente a otros materiales y ambientes. Son estructurales los que sirven para hacer todo tipo de estructuras y soportes, es decir, que se utilizan por sus propiedades mecánicas.

3.1 Propiedades químicas

Las propiedades químicas son las características que relacionan la estructura de un material y su formación a partir de los elementos. Estas propiedades normalmente se miden en el laboratorio de análisis químico y no pueden determinarse por observación visual; usualmente es necesario cambiar o destruir el material para medirlas.

Las principales propiedades químicas son: la composición, la microestructura (las fases, el tamaño de las moléculas o de los cristales), la resistencia a la oxidación y a la corrosión y las inclusiones.

La composición se refiere a los componentes elementales o químicos que constituyen material y sus propiedades relativas.

3.2 Propiedades físicas

Dentro de este grupo se reúnen las propiedades primarias o básicas de la materia, con otras que son consecuencia de fenómenos motivados por agentes físicos externos. Las más importantes son:

La extensión y las propiedades magnéticas, ópticas, eléctricas, gravimétricas, acústicas y térmicas (calor específico, calor latente de fusión, conductividad térmica, dilatación térmica), puntos de ablandamiento y ebullición. Las propiedades físicas son características que pertenecen a la interacción entre los materiales y los varios campos de energía (gravitatorios, magnéticos, eléctricos, térmicos, acústicos, ópticos) o con otras formas de la materia. En esencia, caen en el campo de las ciencias físicas, generalmente se pueden medir sin destruir o cambiar el material. El color es una propiedad física, se puede determinar simplemente mirando el material. La densidad se puede determinar pesando y midiendo el volumen del objeto, es una propiedad física, el material no tiene que cambiarse ni destruirse para medir esta propiedad.

3.3 Propiedades mecánicas

Las propiedades mecánicas son características del material que se despliegan cuando se aplica una carga y generalmente se relacionan con el comportamiento elástico o inelástico del material. Para determinar estas propiedades es común que haya que destruir el material. El término *mecánico* se aplica a esta categoría de propiedades porque se usan para indicar lo adecuado de un material para usarse en aplicaciones mecánicas, partes que soportan carga, absorben impacto, soportan desgaste, etc. Las principales propiedades mecánicas son: la resistencia última, la dureza, el módulo elástico, la plasticidad, la resistencia a la cadencia, la resiliencia, la tenacidad, la fragilidad, la resistencia a la fatiga, la resistencia a la fluencia lenta, la ductilidad.

3.4 Propiedades dimensionales y tecnológicas

Las propiedades dimensionales son importantes en la selección de los materiales y se refieren a

temas que no aparecen en los manuales, como tolerancias, acabados, textura superficial, formas y tamaños disponibles y la fabricabilidad.

La fabricabilidad o facilidad de fabricar un objeto con el material en mención es una propiedad que depende de otras, denominadas propiedades tecnológicas, como son la maquinabilidad, la colabilidad, la soldabilidad, la maleabilidad, la ductilidad, la templabilidad, la fusibilidad, etc.^{4,5}

4. ESTRUCTURA

De acuerdo con los conocimientos actuales, se pueden considerar esquemáticamente varios niveles de la estructura de los materiales. El más profundo de ellos es el constituido por la estructura interna de las llamadas partículas fundamentales, esto es, los quarks, y sus interacciones. Luego viene el nivel formado por las partículas elementales (fotones, leptones, electrones, mesones, protones, neutrones, hiperones) en estado libre, es decir, cuando no forman parte de una estructura más compleja. En seguida se tiene el nivel del núcleo atómico, en donde ocurren procesos con energías elevadas dentro de distancias sumamente pequeñas. Después vienen los átomos, de los cuales hacen parte los núcleos como partículas indivisas, en cuyos procesos se encuentran implicadas energías menos elevadas y distancias algo mayores.

A continuación se tienen los procesos Químicos, que comprenden las reacciones entre los átomos como partículas indivisibles y entre los cuales se produce la inmensa variedad de composiciones y desintegraciones cristalinas. Luego se tienen los movimientos y las transferencias de energía que tienen lugar dentro de los cristales, que constituyen los procesos termodinámicos. Después vienen los procesos macro o de dimensiones visibles a simple vista, entre los cuales están los efectos de los procesos de fabricación. De este modo la estructura debe considerarse en sus dimensiones quárkicas (femtoestructura), electrónicas y atómicas (picoestructura), cristalinas (nanoestructura), en la organización de las fases (microestructura) y en los efectos de la fabricación y el montaje (macroestructura).^{6,7}

5. DISEÑO

El diseño en ingeniería es la sinergia de las actividades de la ingeniería y del diseño enfocadas en un producto particular. Es interesante comparar las características

contradictorias entre las actividades de la ingeniería y las actividades del diseño, como se ve en la tabla 2, estas se mezclan de tal modo en el concepto de diseño ingenieril que éste solo es el motor de la profesión.

Tabla 2. Las actividades de la ingeniería y del diseño se mezclan perfectamente en el diseño ingenieril

INGENIERÍA	DISEÑO	DISEÑO INGENIERIL
Actividad que demanda tiempo	Actividad mental	Actividad iniciada mentalmente que consume tiempo
Físico	Conceptual	Productos físicos desarrollados conceptualmente
Cercano a la ciencia	Cercano al arte	Trabajo creativo basado en principios científicos
Metodológico	Intuitivo	Metodología empezada intuitivamente
Resuelve problemas	Crea problemas	Las cadenas Solución –problema y Problema –solución son irrompibles

A continuación de presentan algunas definiciones de diseño ingenieril.

- Una actividad iterativa de toma de decisiones para producir planes por medio de los cuales se convierten las Fuentes, ojalá óptimamente, en sistemas o aparatos para responder a las necesidades humanas.
- El proceso que usa las herramientas de la ingeniería – matemática, gráficos, lenguaje - y principios científicos para desarrollar un plan, que realizado plenamente satisfará una necesidad humana.
- El uso de principios científicos, información técnica e imaginación en la definición de una estructura mecánica, máquina o sistema para llevar a cabo funciones pre-especificadas, con la máxima economía y eficiencia.
- Una actividad con propósito dirigida al objetivo de suplir las necesidades humanas, particularmente aquellas que pueden responderse con los factores tecnológicos de nuestra cultura.
- El completo proceso intelectual desde la concepción de la idea basada en la inspiración, el conocimiento y la experiencia hasta su final realización técnica y comercial.
- La solución de problemas basada en la ciencia con sensibilidad social. Una actividad de alto nivel intelectual. La parte creativa de la ingeniería.

- La actividad donde varios principios técnicos y científicos se emplean para tomar decisiones respecto a la selección de materiales y su ubicación para formar un sistema o aparato, que satisfaga un conjunto de requerimientos especificados o implícitos.
- El propósito esencial de la ingeniería.
- Un proceso iterativo de toma de decisiones para desarrollar sistemas o aparatos ingenieriles mediante el cual los recursos se convierte óptimamente en los fines deseados.

En resumen, el diseño ingenieril es la actividad de diseño bajo las constricciones de la ingeniería. Dentro del método ingenieril el proceso de diseño abarca las actividades y eventos que transcurren entre el reconocimiento de un problema y la especificación de una solución del mismo que sea funcional, económica y satisfactoria de algún modo.

El diseño es el proceso general mediante el cual el ingeniero aplica sus conocimientos, aptitudes y puntos de vista a la creación de dispositivos, estructuras y procesos. Por tanto, es la actividad primordial de la *práctica* de la ingeniería.⁸

6. EL DISEÑO DE MATERIALES

En lo que se refiere a la ingeniería de materiales el paradigma central es la interrelación Secuencial de procesamiento, estructura, propiedades y desempeño, como se ve en la estructura lineal de la figura 1.

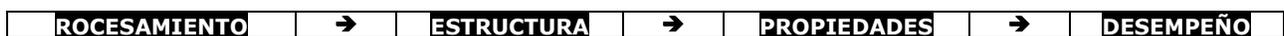


Figura 1. Estructura lineal de la ciencia y la ingeniería de materiales, con la definición de los subsistemas primarios

La noción de los materiales como sistemas fue ampliamente desarrollada por Cyril S. Smith, quien, sobre todo, identificó los subsistemas que constituyen la estructura, como ya se mencionaron. Pero este concepto se puede ampliar a los demás bloques de la figura 1, donde cada uno es un subsistema primario que se puede dividir en una jerarquía de subsistemas que interactúan, como ya se desglosó para las propiedades.^{9, 10}

Un sistema en este caso es un agrupamiento complejo de componentes que es divisible en una jerarquía de subsistemas que interactúan y se pueden representar con un diagrama de bloques, como se ve en la figura 2 para el caso de los aceros de ultra alta resistencia con endurecimiento secundario en el revenido. En ella se muestran los subsistemas microestructurales clave, que controlan las tres propiedades primarias de interés: resistencia Mecánica, tenacidad y resistencia al hidrógeno, junto con las etapas (subsistemas) del procesamiento que afectan cada una de ellas.

Como se ve, el material de la figura 2 es parte de una jerarquía de sistemas mayores. La aplicación del acero como componente que soporta carga en una estructura ingenieril es lo que define su necesario desempeño y cuantifica las tres propiedades primarias requeridas. Más aún, como para todos los sistemas, el objetivo último del sistema es tener una combinación adecuada de propiedades, esto demanda balanceos entre los objetivos en conflicto de los subsistemas primarios (por ejemplo tenacidad vs resistencia), para que funcione con la máxima eficiencia el sistema debe diseñarse.

Es necesario recalcar que cuando se diseña un material para una aplicación, se deben considerar muchos factores, por ejemplo, el material debe tener las propiedades físicas y mecánicas deseadas, debe ser posible procesarlo o manufacturarlo para lograr la forma deseada, y debe proporcionar una solución económica al problema de diseño que se quiere solucionar. También es esencial que estos requerimientos se satisfagan de una manera que proteja el ambiente –quizás estimulando el reciclaje–. Para responder a esas demandas el ingeniero tendrá que balancear los distintos aspectos con el fin de lograr una solución buena, bonita y barata. or ejemplo, el costo del material normalmente se

calcula con base en el peso, por tanto, debe considerarse la densidad de los materiales como un parámetro esencial en el diseño y selección de éstos. El aluminio puede costar más por kilo que el acero, pero sólo pesa la tercera parte y aunque las partes hechas de aluminio serán más gruesas, pueden ser más baratas que las de acero, por la diferencia de peso.

En algunas ocasiones, particularmente en las aplicaciones aeroespaciales, el peso es crítico, usando materiales livianos y resistentes los vehículos se pueden diseñar para mejorar la utilización del combustible, en estos casos es muy importante la relación resistencia/peso.¹¹

6.1 Análisis

Los pasos básicos del análisis de sistemas son la formulación del problema, la definición del sistema y el sistema más amplio dentro del cual funciona, y la definición de los objetivos del sistema. En el caso de los materiales, la formulación del problema consiste en identificar una amplia necesidad de desempeño de un material. Entonces se define el sistema material en términos de la clase de material y su microestructura, y se identifican los subsistemas importantes y sus interacciones y se representan en un diagrama como el de la figura 2.

Ashby ha descrito muy bien la manera como las relaciones propiedades/desempeño se pueden usar para establecer las propiedades cuantitativas objetivas de un material; en este método una serie de parámetros de propiedades combinadas se superimponen sobre gráficos de propiedades con el fin de comparar los materiales aptos para tal propósito, figura 4.^{14, 15} Ese análisis no sólo es útil para que el ingeniero seleccione los materiales disponibles, sino que sirve para definir las propiedades objetivas y diseñar un material mejorado que compita con los conocidos.

Para los aceros de ultra alta resistencia de la figura 2, las propiedades objetivas se definieron con base en un aumento significativo en la resistencia, superior al de los aceros comerciales existentes para aplicaciones estructurales avanzadas, como el tren de aterrizaje de un avión. Esto define una resistencia última entre 2.000 y 2.400 MPa, correspondiente a una dureza de 55 a 60 RC. La tenacidad objetiva se

define con la relación tenacidad /resistencia requerida para la grieta crítica mínima deseada. Luego se especificó la resistencia al hidrógeno

teniendo en cuenta la mínima relación K_{ISCC} / K_{IC} , donde K_{ISCC} cuantifica el umbral de la tenacidad en corrosión bajo tensión.

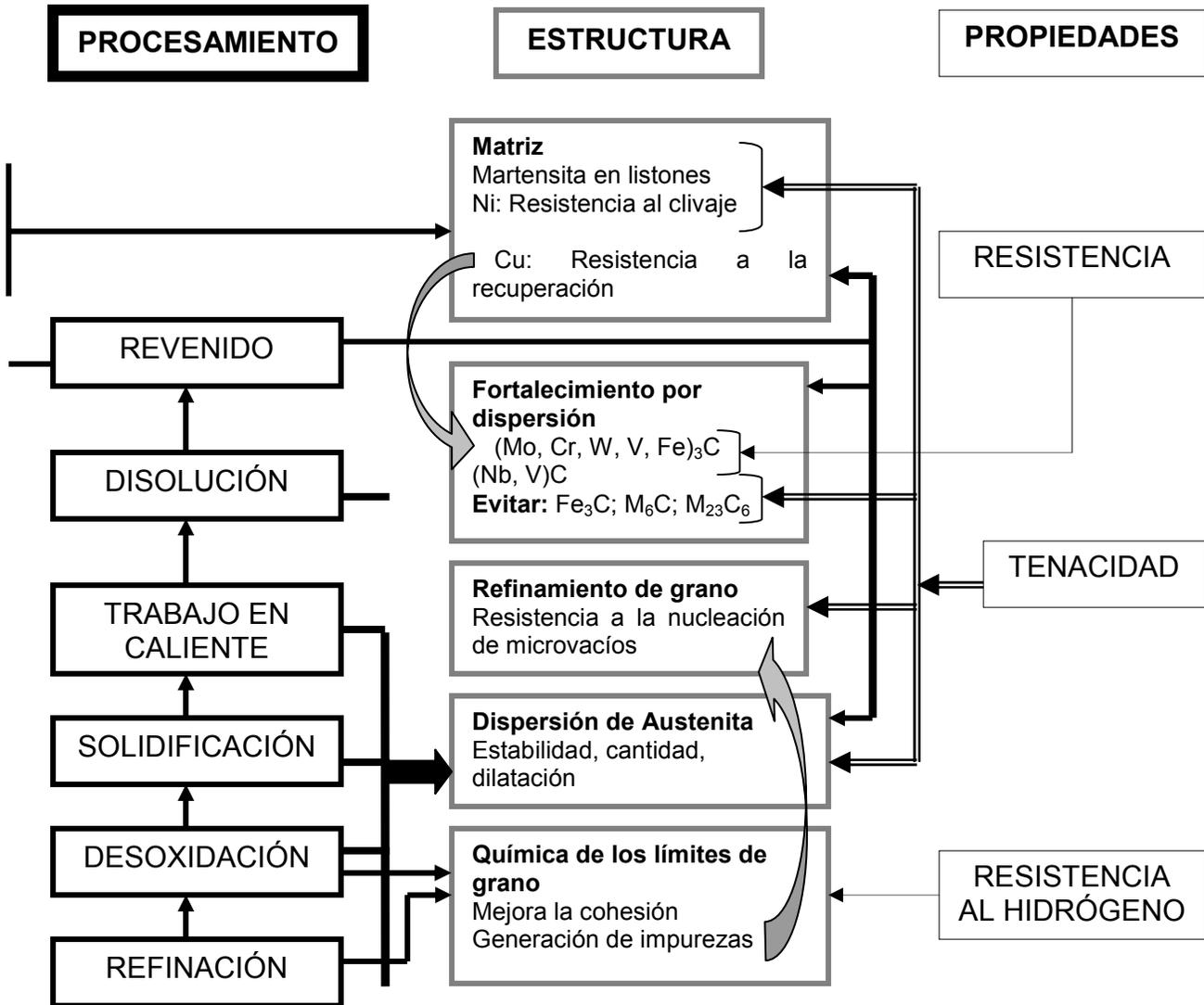


Figura 2. Diagrama de bloques que ilustra la estructura de los aceros al Co-Ni, de endurecimiento secundario, como un sistema^{12,13}

Los pasos secuenciales de los sistemas generales para diseñar materiales se muestran en la figura 3, los que se examinarán brevemente a continuación.

Otro paso importante en el análisis es la organización de un equipo interdisciplinario de diseño en cual juegan parte fundamental los científicos e ingenieros de materiales.¹⁶

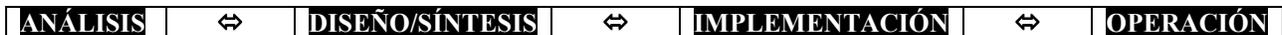


Figura 3. Etapas del diseño de materiales

6.2 Diseño y síntesis

El primer paso en la síntesis que se debe entender en el diseño es el modelamiento. Idealmente, se deben desarrollar modelos cuantitativos para cada una de las importantes relaciones estructura/propiedad y propiedad/estructura descritas en la figura 2, abriendo un ordenamiento de escalas estructurales. Aunque es inevitable el empirismo en algún nivel, los modelos más útiles, especialmente para los fenómenos no lineales, que operan en los materiales, deben ser tan fundamentalmente mecanicistas como sea

Possible. Sin embargo, es útil priorizar los fenómenos y decidir sobre la precisión necesaria en los modelos requeridos.

La segunda etapa de la síntesis es la aplicación real de los modelos en la simulación del material tanto en la escala local de los subsistemas microestructurales como en la escala global del sistema total. Se debe optimizar el sistema entero, no sus componentes, los cuales pueden competir entre ellos. Esto porque el desempeño del material demanda la combinación de propiedades y sería inútil hacer una de ellas excelente en detrimento de otra, que podría degradarse.

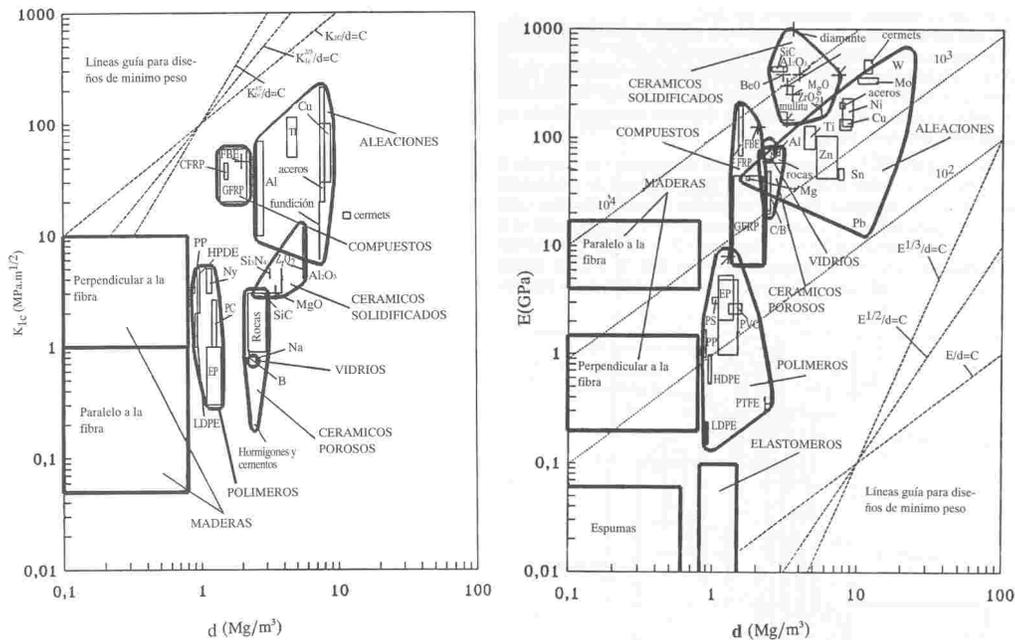


Figura 4. Mapas de materiales, según el sistema de Ashby. a. Tenacidad de fractura (K_{Ic}) vs densidad (d); b- Módulo de elasticidad (E) vs densidad (d)¹⁷

Otro aspecto importante de la optimización del sistema es la aplicación de la simulación en la identificación de variables sensibles (en la composición y el procesamiento del material) con el fin de minimizar la sensibilidad hacia la controlabilidad.

6.3 Implementación y operación

Como se muestra en la figura 3, el próximo paso en estos sistemas materiales es la implementación, que acá corresponde a la Producción del material prototípico.

La comprobación de las predicciones del modelo mediante la caracterización de los prototipos permite refinar los modelos, mediante un proceso iterativo denotado por las flechas en doble sentido.

Cuando se ha logrado una suficiente optimización, se entra en la etapa de operación que corresponde a establecer la composición y el procesamiento del material.

Acá debe reconocerse que la práctica tradicional mediante la cual se desarrollan los nuevos materiales consiste en la evaluación simultánea

de un conjunto de materiales con variaciones en la composición y el procesamiento, que permitan obtener correlaciones empíricas proceso/estructura con uso mínimo de los detalles estructurales.

7. DISEÑO CON HERRAMIENTAS COMPUTACIONALES

El proceso de diseño de materiales que se ha descrito hasta acá, aunque sistemático, es obviamente un enfoque de ingeniería de sistemas que no vacila en usar toda la experiencia que se tenga, en todos los campos de la ingeniería, pero, ¿se pueden diseñar con el computador nuevos materiales con propiedades optimizadas? Los avances en el modelamiento al nivel atómico junto con los rápidos aumentos en las capacidades de los computadores han llevado a los científicos a decir que sí.

Aunque no en el campo de los aceros que se han usado como ejemplo, la habilidad de diseñar nuevos materiales, a partir de los principios de la mecánica cuántica, mediante el uso de computadores, es uno de los campos que más ha crecido en los últimos años y en el cual trabajan disciplinas como la física, la química, la ciencia de los materiales y la biotecnología.^{18, 19}

El objetivo último del científico que modela y simula materiales al nivel picoscópico es responder al siguiente tipo de preguntas: ¿Cómo es realmente la materia a escala atómica? ¿Cómo se pueden modificar los enlaces entre los átomos para crear materiales novedosos con propiedades optimizadas? ¿Cómo se pueden combinar los materiales masivos para que proporcionen propiedades nuevas y deseables, ausentes en los componentes iniciales? Para responder a estas cuestiones el científico cuenta con un conjunto de leyes que gobiernan la materia a esos niveles: la mecánica cuántica.

Los científicos de materiales pensaron que, equipados con las leyes de la mecánica cuántica y los computadores poderosos, se podía emprender la formidable tarea de diseñar materiales nuevos haciendo los cálculos de cada átomo en el material hasta llegar a las propiedades necesarias.²⁰ Por esta razón, los métodos de la ciencia de los materiales

computacional se pueden dividir en dos clases: aquellos que no usan ninguna cantidad obtenida empírica o experimentalmente y los que lo hacen. Los primeros se llaman métodos *ab initio* o métodos de los *primeros principios*, mientras que los otros se denominan métodos empíricos o semiempíricos. Los métodos *ab initio* son particularmente útiles en la predicción de las propiedades de nuevos materiales o de nuevas estructuras complejas, y para predecir las tendencias en un amplio espectro de materiales. Los métodos semiempíricos son excelentes para interpolar y extrapolar a partir de propiedades conocidas.^{21, 22}

Sin embargo es imposible aplicar los métodos *ab initio* desde los átomos individuales. Es verdad que las ecuaciones de la mecánica cuántica que gobiernan el comportamiento de los electrones (como las ecuaciones tipo Schrödinger) se pueden escribir de una forma más o menos compacta; a pesar de ello, los cálculos prácticos se hacen excesivamente difíciles debido al gran número de grados libertad y las interacciones entre partículas. Aún la brizna más pequeña de materia visible contiene varios millardos de electrones, y la complejidad de su movimiento es enorme. Por tanto, el cálculo de un sistema tan complejo está más allá de la capacidad de cálculo de los computadores actuales más poderosos.

Por las razones anteriores los científicos de materiales, en general, no intentan un cálculo exacto –que, como se anotó, en la actualidad es imposible–, sino que aproximan las leyes físicas a un cálculo menos exacto, pero factible. Por ello el éxito espectacular de la moderna teoría cuántica en la simulación de materiales se debe a que el grado de inexactitud es muy pequeño y se puede controlar. Uno de los principios en que se basan los métodos *ab initio* aproximados, se postuló al principio del decenio de 1960, y es la teoría de la densidad funcional o de la función de densidad, la cual prueba que la energía base de un sistema electrónico estable M es función solamente de la densidad electrónica $\rho(r)$.^{23, 24, 25}

Este concepto ofrece grandes ventajas computacionales puesto que la densidad de electrones se convierte en la variable básica, en vez de complicadas funciones de electrones de muchos cuerpos. Más aún, está poderosa teoría

reduce el problema el movimiento enredado y mutuamente dependiente de los electrones, a uno solo que describe el movimiento de un solo electrón, independiente, en un potencial efectivo donde el electrón se mueve. Esta descripción simplificada, pero rigurosa, significa que los electrones se pueden tratar como si fueran independientes unos de otros sin perturbar seriamente los resultados. El marco de la teoría de la densidad funcional proporciona una técnica poderosa y precisa para calcular las propiedades de los materiales basándose en los primeros principios.

La teoría de la densidad funcional, asociada con la creciente capacidad de computación, llevó a una explosión en la actividad de calcular las propiedades de los materiales usando las leyes de la mecánica cuántica. A principios del decenio de 1980, era evidente que las propiedades de algunos monocristales se podían calcular con sorprendente precisión usando solamente esas leyes. Pronto se empezaron a reproducir muchas propiedades de los materiales que previamente sólo se podían determinar experimentalmente. Ejemplos de ello fueron el espectro de vibración atómica en los sólidos, los cambios en la estructura cristalina cuando se aplicaba una fuerza externa, y las propiedades ópticas, electrónicas y magnéticas. Los investigadores de muchas latitudes reportaron éxitos similares en una gran variedad de materiales. Se aprendió que la computación electrónica basada en las leyes picoscópicas de la mecánica cuántica realmente podía decir cómo se comportaban los materiales reales.^{26, 27}

Pero hay una o dos limitaciones en este enfoque: aún con los tremendos avances que emergieron de la teoría de la densidad funcional, las simulaciones dinámicas en gran escala de materiales y procesos, basadas en verdaderos primeros principios, son todavía un desafío formidable por las razones ya anotadas. Más aún, no es posible aplicar métodos de primeros principios a los sistemas a temperaturas diferentes al cero absoluto, donde las propiedades electrónicas deben ser el promedio de las muchas configuraciones posibles de iones que constituyen un sistema.

Afortunadamente, el conocimiento de cómo interactúan los electrones y los núcleos en los materiales se puede usar como base derivar modelos simples, pero exactos que reproducen las interacciones.

En resumen, la ciencia de los materiales computacional es la utilización de modelos matemáticos y las herramientas informáticas para el estudio de los fenómenos en los materiales. Estos modelos tratan de predecir la estabilidad y equilibrio de las fases, las tasas de las reacciones o transformaciones y las relaciones estructura – propiedades.

Un ejemplo es el caso de las superaleaciones necesarias en aplicaciones como las turbinas de avión y los componentes de motores de avión, que se presenta más adelante. Las superaleaciones se pueden definir como “aleaciones desarrolladas para servicio a temperatura elevada, generalmente basadas en elementos del grupo VIII, sometidas a tensiones relativamente elevadas y aplicadas en condiciones donde muchas veces se requiere alta estabilidad superficial.” Las superaleaciones incluyen los sistemas basados en el níquel, el cobalto, el hierro y el hierro-níquel. Las basadas en níquel sin el grupo más importante; la mayor parte de las aleaciones comerciales tiene diez o más elementos constituyentes y más de diez elementos traza. El desarrollo de las superaleaciones es un ejemplo del uso de los métodos acá señalados.

7.1 Diseño de aleaciones

A pesar del ejemplo que se presentó sobre el diseño de aceros, se ha señalado que, tradicionalmente, la metalurgia ha sido una de las actividades más empíricas. Durante cientos de años se han creado y mejorado las aleaciones desde el bronce hasta el acero inoxidable explotando, en la mayoría de los casos, descubrimientos casuales hechos al mezclar metales. En las últimas décadas esta búsqueda ha sido más sistemática y con el advenimiento de la metalurgia computacional se ha desarrollado el

entendimiento de cómo se cambian las propiedades de un metal aleándolo con otro.²⁸

En metalurgia, sin embargo, el desarrollo de una nueva aleación con atributos particulares es todavía un reto muy grande: las candidatas son, casi siempre, demasiado numerosas para ensayarlas individualmente. Hay varias docenas de metales diferentes, y aún si las aleaciones fueran binarias, hay demasiadas combinaciones, sin olvidar que las proporciones de cada metal se pueden variar.

Por medio de la metalurgia computacional esto se puede simplificar, por ejemplo, Johannesson y sus colegas buscaron las aleaciones que mejor pudieran resistir las temperaturas elevadas y la corrosión entre las posibles combinaciones de 32 metales, con hasta cuatro metales diferentes en cada aleación. En total resultaron 192.016 aleaciones posibles. Calculando las propiedades logradas a partir de los *primeros principios*, combinaron las aleaciones promisorias para generar otras nuevas más complejas y seleccionaron la mejor de cada generación. También afinaron la búsqueda con consideraciones prácticas, por ejemplo excluyendo los metales más costosos.²⁹

Esta aproximación identificó varias superaleaciones que ya se utilizan (encontradas por el costoso método del ensayo y el error). También sugirió nuevas aleaciones promisorias, las cuales se pueden experimentar en vez de ensayar con toda la gama entera de posibilidades. Es decir que la metalurgia computacional puede “reducir grandemente el número de experimentos necesarios para el desarrollo de nuevas aleaciones”.

Usando métodos semiempíricos los ingenieros del Marshall Space Flight Center han desarrollado una nueva aleación de alta resistencia, de aluminio-silicio, que promete ayudar a reducir las emisiones de los motores y a mejorar el kilometraje conseguido con la misma cantidad de gasolina, tanto en automóviles y barcos, como en vehículos recreativos.

La aleación ha sido inventada por Jonathan Lee y es muy resistente al desgaste, y que exhibe una gran resistencia a temperaturas de entre 260 y 370° C. Comparativamente, cuando es probada a

315° C, es entre tres y cuatro veces más resistente que las aleaciones de aluminio convencionales y se puede producir a un precio de medio dólar por kilogramo, aproximadamente.³⁰ De la misma manera se están diseñando otras aleaciones, sobre todo de aluminio, magnesio y titanio.^{31, 32}

7.2 Diseño de materiales cerámicos

Sin duda, los diagramas de fase son la herramienta más básica para diseñar materiales cerámicos monofásicos o polifásicos monolíticos, con propiedades específicas.³³ Esto se ha demostrado con distintos materiales, como los basados en mullita y los basados en nitruro de silicio. Así mismo la naturaleza constituye en sí misma una fuente inagotable de inspiración para el diseño de nuevos materiales cerámicos con propiedades únicas. Tal es el caso de los materiales laminados y de los materiales con función gradiente. De la misma manera los recubrimientos reactivos constituyen una ruta plausible para el desarrollo de nuevos materiales cerámicos reforzados con fibras resistentes a la oxidación a temperaturas elevadas (más de 1200°C).

De otro lado, debe tenerse en cuenta que la cerámica es sólo una parte del estudio de los materiales y por tanto, muchos aspectos del modelamiento y la simulación en cerámica se basan en otros campos, sobre todo los relativos a los metales y los polímeros; por esta razón, todo lo que dice en las secciones 8 y nueve es válido para el diseño de los materiales cerámicos.³⁴

7.3 Diseño de polímeros

El diseño de materiales ha estado, desde los inicios, ligado al desarrollo de los polímeros. A principios del siglo XX el hecho de que éstos sean largas cadenas compuestas por muchas pequeñas unidades químicas, y que la longitud de la cadena desempeñe un papel vital en la determinación del comportamiento y las propiedades físicas puso de relieve la necesidad de crear herramientas para determinar el peso molecular y, en consecuencia, la longitud de la cadena. Una de las primeras herramientas para ello fue la ultracentrifugadora, inventada por el

químico sueco Theodor Svedberg. Ésta permite hacer girar muestras a altas velocidades y separar las moléculas según su tamaño. Se puede emplear para calcular el tamaño de las moléculas y la distribución de los tamaños en una muestra dada de polímero.³⁵

A finales del decenio de 1920, ya equipados con mejores herramientas y teorías, los científicos especializados en polímeros consiguieron adelantos espectaculares. En 1928, la compañía DuPont contrató al químico Wallace Hume Carothers para crear nuevos tipos de polímeros en un nuevo laboratorio dedicado a la investigación básica. Carothers unió con extrema precaución compuestos orgánicos muy pequeños formando cadenas de gran longitud y examinó las propiedades de los productos obtenidos. Descubrió que la unión de moléculas en cadenas largas daba lugar a materiales más densos, resistentes y rígidos. En 1930, el planteamiento sintético sistemático de Carothers comenzó a dar sus frutos cuando descubrió un nuevo tipo de polímeros denominado poliamidas o "náilon". Estos polímeros podían fundirse y convertirse en una fibra de gran resistencia.

Se entiende pues, que el diseño tiene una larga tradición en el caso de los polímeros, así continúa siendo y todo lo que se menciona a continuación sobre el modelamiento de los materiales es perfectamente aplicable al caso de los polímeros y sobre todo a los biopolímeros.³⁶

8. MODELAMIENTO PREDICTIVO

Los ingenieros de materiales saben de las grandes teorías continuas clásicas de la física, la elasticidad, la termodinámica y el electromagnetismo. En la actualidad los métodos de elemento finito, de diferencias finitas y dinámica de fluidos computacional son familiares para los investigadores en ingeniería. Todo ello posibilita la optimización de los diseños y procesos, y algunas veces hasta elimina la necesidad de hacer prototipos reales (opuestos a los virtuales). El modelamiento de materiales ya se ha visto que es la herramienta del ingeniero y hace uso de la información empírica y de los modelos básicos pero generales. Si embargo, la idea de modelamiento ha sido llevada más allá. El modelamiento predictivo de materiales reconoce que, bajo las

imágenes macroscópicas de los materiales, que se conocen y aman, se pueden encontrar estructuras microscópicas, atómicas y electrónicas. ¿Qué debe conocer la persona práctica sobre esto? Los cálculos de la estructura electrónica que permite el estado del arte pueden llevar a cementos con el tiempo correcto de fraguado, o a la mejor selección de transductores piezoeléctricos. Los estudios atomísticos pueden identificar el catalizador correcto, o el comportamiento de combustibles nucleares en condiciones extremas. La comprensión cuantitativa de la estructura en la mesoescala y cómo se crean esas estructuras pueden mejorar los polímeros, los helados y los recubrimientos que actúan como barreras térmicas.

La termodinámica cuantitativa y el modelamiento cinético y estadístico permiten la producción de aleaciones con desempeño excepcional. Detrás de este trabajo están los computadores comunes y los de última generación. Aún más importantes son los investigadores, quienes pueden ahondar en los problemas industriales para encontrar la clave científica, y plantearlos de manera que lleven a alguna parte, hacia adelante, como a menudo lo hacen. Pero, quizás más a menudo, el mensaje es "Esa no es la ruta" o "Esa fue una buena idea, pero no funcionó": ese mensaje no gana amigos, pero puede salvar compañías.^{37, 38, 39, 40}

El modelamiento predictivo de materiales empezó en los grandes laboratorios nacionales de los países del primer mundo. Las investigaciones de largo alcance, diferentes a las puntuales, empezaron en los laboratorios industriales (como los de IBM donde se desarrollaron los códigos de la estructura de bandas en el decenio de 1950) de Estados Unidos y en los gubernamentales (como Harwell, del Reino Unido, en los decenios de 1950 y 1960). Se hizo mucho trabajo en los laboratorios del programa nuclear como Harwell, Brookhaven y Argonne, donde se demostró el enorme espectro de los estudios de materiales necesarios para impulsar una industria basada en la nueva ciencia. Entre estos se pueden señalar los siguientes.

Primero, los materiales representaban retos. Las estructuras de soporte (recipientes a presión, materiales de soldadura, tuberías) evolucionaban

bajo la radiación. Hubo participación significativa y no predicha de los límites de grano. El espectro químico fue grande, pues incluía unos 100 elementos, con situaciones nuevas, como la química superficial del grafito. Se necesitaba entender las intercaras entre el UO_2 consumido y los recubrimientos.⁴¹

Segundo, el procesamiento de los materiales era extremadamente variado. Los productos de la fisión incluían especies inertes, como el He, y débiles, como Sr, I, Cs. La seguridad incluía las propiedades térmicas, mecánicas y eléctricas del UO_2 bajo condiciones extremas, 2000 – 3000° C, cuando es crucial el comportamiento de pequeña polarización y los cálculos de estructura de bandas son completamente inadecuados.

Tercero, había una enorme cantidad de fenómenos materiales para modelar. La comprensión del daño por radiación llevó al estado del arte en la dinámica molecular y en los cálculos atómicos estáticos. La importancia de las intercaras entre medios complejos impulsó el estudio de éstas de los sólidos volumétricos. La comprensión del daño por radiación, especialmente en los no metales, llevó a extensos estudios sobre espectroscopia de los defectos, en los cuales eran importantes los estados excitados. La evolución de los vacíos y el hinchamiento demandaron modelamiento mesoscópico. La presencia de productos de fisión requirió el análisis de sistemas metaestables, donde tanto los estados de carga como la historia (comportamiento jerárquico) eran importantes.

El modelamiento de detectores al nivel de aparatos fue necesario para optimizar la sensibilidad y entender problemas como las perturbaciones puntuales. Más aún, la extensión de los métodos de los aceleradores a industrias diferentes a la nuclear (como la implantación iónica de semiconductores) disparó el modelamiento de sistemas en los cuales había grandes gradientes de concentración y donde puede haber excitación de electrones.⁴²

Los grandes laboratorios nacionales fueron cruciales en las etapas iniciales del modelamiento de materiales pero luego el campo se ha desarrollado hasta ser una actividad

internacional, con un gran componente académico y una nueva industria de software. Están ocurriendo enormes cambios en la ciencia, en el hardware y el software de los computadores, y en las industrias a las cuales pueden servir. La tecnología de la información está cambiando, y su impacto sobre la manera como trabaja la gente es dramático. Tales cambios, acoplados con la reestructuración de muchas industrias familiares, a menudo a expensas de sus funciones de R &D, suscitan dudas sobre el futuro. Todos han visto grandes cambios en las últimas dos décadas: cambios en la informática, sobre todo el surgimiento del PC; la evolución de las industrias de software; la pérdida de investigación en los grandes laboratorios nacionales, estatales o industriales; la reorganización de la industria y el crecimiento de los componentes internacionales tanto en el modelamiento como en las industrias con que se relaciona. Por eso se están evaluando los caminos a seguir.⁴³

Un asunto claro es que el modelamiento de materiales no es un simplemente un asunto de la física de la materia condensada. Hay exigencias por parte de la tecnología: los materiales fotográficos deben funcionar; los adhesivos deben pegar. El comportamiento durante toda la vida es lo que está en juego, sea la vida de una película de silicio bajo tensiones eléctricas o el álabe de una turbina a temperaturas elevadas. Los usuarios deben aceptar el costo y la apariencia. Hay constricciones económicas, de seguridad y ambientales: las bolsas de polietileno y los tarros de aluminio pueden estar entre las innovaciones más exitosas del siglo XX, pero pueden crear graves problemas de disposición de residuos. Los físicos convencionales del estado sólido se pueden concentrar en una franja más estrecha de sistemas y situaciones que la del modelamiento de materiales. Los frijoles cocinados, la espuma de caucho, los combustibles nucleares y los materiales soldados son todas áreas legítimas para el modelador de materiales. Las propiedades pueden ser térmicas, mecánicas, eléctricas, magnéticas, ópticas (como la fotocromía), los catalizadores o los sensores de gas. Las escalas dimensionales van desde las atómicas hasta las macroscópicas (o de

ingeniería), con un intervalo mesoscópico clave para el cual es importante la microestructura. Y la escala de tiempo va desde los femtosegundos hasta las eras geológicas.⁴⁴

Es claro, entonces, que el modelamiento de los materiales busca ayudar a mejorar los materiales para necesidades identificables. Que esto signifique nuevos materiales, nuevos procesos, nuevos métodos de inspección, depende del contexto, las restricciones y las tendencias. El estilo y nivel del modelamiento depende fuertemente del problema. La ciencia varía desde simples cálculos de alcance, pasa por el uso sistemático de potenciales interatómicos y bases de datos termodinámicos hasta el estado del arte de los cálculos de la estructura electrónica.^{45, 46}

Pero el modelamiento no depende solamente de la ciencia: hay constricciones como el tiempo y la financiación disponibles, y desde el punto de vista de la solución deseable. Hay una suposición implícita de que el hardware o el software significan la limitación más seria. Esto está cambiando. La parte más dura ahora parece ser la capacidad mental y la experiencia. ¿Es posible enmarcar el problema de manera que se pueda modelar a un nivel adecuado de detalle? ¿Se pueden entender los resultados del modelamiento lo suficientemente bien como para dar respuestas adecuadas? ¿Se tiene suficiente confianza esas respuestas para tomar una decisión no popular: se le podrá decir un entusiasta gerente “No se puede hacer de esa manera”, por ejemplo? Una confiabilidad robusta es la clave de la aceptación del modelamiento.

9. ESTADO DEL ARTE Y TIPOS DE MODELAMIENTO

Siguiendo lo que plantea el *European White Book on Fundamental Research in Materials Science* y el libro *Introduction to materials modelling* editado por Zoe Barber, puede decirse que el modelamiento actual de materiales se puede caracterizar de la manera siguiente, ver figuras 5 y 6:

- Es una aproximación científica a los problemas tecnológicos. Busca entender, controlar y diseñar las propiedades estructurales y funcionales de los materiales para productos industriales

con aplicaciones específicas, con durabilidad y aceptación adecuadas. No es el estudio teórico de fenómenos genéricos o clases de materia, como se ha tratado tradicionalmente en la física y la química de la materia condensada.

- Es un enfoque cuantitativo con poder predictivo. Desarrolla y emplea herramientas matemáticas e informáticas para los cálculos numéricos y analíticos. Esas herramientas, son precisas, cuantitativas y predictivas así como robustas y confiables.
- Es interdisciplinaria y sinérgica. Usa y combina herramientas variadas desde la práctica de la ingeniería de materiales hasta la ciencia fundamental de la materia condensada. Cruza las escalas de espacio y tiempo en muchos órdenes de magnitud mediante la selección juiciosa de los enfoques: mecánica cuántica y las teorías: atómica, del continuo y estadística.

δ		¿Qué se puede modelar?
Métodos clásicos: Mecánica de fluidos, elemento finito, teorías de la difusión, termodinámica y mecánica estadística	→	Materiales: Metales, cerámicos, polímeros, biomateriales, nanoestructuras, arreglos moleculares.
↑		Síntesis: síntesis y procesamiento, crecimiento de películas delgadas, nanofabricación, biomimética, auto-organización
Métodos mesoscópicos: Teorías de gradiente continuo, dinámica molecular, métodos de enlace fuerte.	→	Estructura: cristalina, amorfa, macromoléculas, puntos cuánticos...
↑		Propiedades: módulos, dureza, comportamiento tribológico, conductividad...
Métodos ab initio: Teoría cuántica, funciones de densidad...	→	Fenómenos: defectos y fallas, difusión superficial y en los límites de grano, dependencia del tamaño y leyes de escalamiento, evolución de la microestructura...

Figura 5. Alcance y métodos del modelamiento de materiales⁴⁷

Por tanto la teoría y el modelamiento de materiales son aplicables y beneficiosas para todo tipo de campos interesados en la investigación en materiales, figura 6.

- Moléculas, cristales, estructuras intrínsecas y propiedades de la materia condensada, superficies e intercaras;
- Estados termodinámicos y procesos cinéticos, reacciones químicas;
- Defectos microscópicos y materiales nanoestructurados;
- Estructuras mesoscópicas y biomateriales.

Los tipos de modelamiento van desde la simple visualización hasta métodos precisos de “estado del arte”, sin embargo lo que más interesa es mejorar los materiales existentes, materiales para necesidades críticas del mercado, el intercambio con los ingenieros y la identificación de rutas que no deben tomarse.⁴⁸ Los alcances pueden ser los mostrados en la figura 6.

Las técnicas (principalmente) numéricas, que se usan en la actualidad, se pueden agrupar en escalas características espacio y de tiempo. Por supuesto los límites son difusos, y al aumentar la potencia de los computadores, se remueven y se desplazan continuamente, figura 7.

<i>Teorías</i>	<i>Desarrollo y mejora de los nuevos materiales</i>	<i>Materiales</i>	<i>Aplicaciones</i>
Clásicas: Métodos de Elemento Finito, elasticidad, plasticidad, fractura, mecánica de fluidos, aerodinámica, teoría de las dislocaciones... Teorías cuánticas: estructura electrónica, construcciones físicas y simulación,... Simulaciones funcionales; diseño y optimización de estructura/microestructura; métodos de ensayo, métodos de fabricación	Concepto	Compuestos	Optoelectrónica
	↓	Superaleaciones	Computadores
	Síntesis		Microelectrónica
	↓		Nuclear
	Caracterización	Cerámicos	Automotriz
	↓		Civil
	Propiedades	Diseño de intercaras	
		Diseño de drogas	Aeroespacial

Figura 6. Teorías, desarrollos, materiales y aplicaciones^{49, 50, 51}

9.1 Modelamiento como un marco para entender

La comprensión de lo que es importante puede provenir de una idealización analítica, posiblemente mediante el uso de un computador

para casos específicos o para alguna parametrización. Los mapas de propiedades reúnen métodos analíticos simples y datos experimentales que ayudan en la preelección de materiales. Este nivel no se debe subestimar. Ello permite escoger rutas que evitan defectos.

9.2 Cálculos de dimensionamiento

Estos se diseñan para decidir que términos importan realmente haciendo los cálculos mínimos sobre energías claves y similares. Tales métodos son comunes para calcular energías de defectos, para comparaciones básicas de diferentes fases, o para distinguir las contribuciones de procesos que ocurren simultáneamente. También se pueden usar para detectar las tendencias en las relaciones entre el desempeño y la estructura. Hay muchos enfoques, desde el simple escalamiento hasta métodos muy complejos, basados en las interacciones atómicas.

9.3 Cálculos “exactos”

En este caso se usa la mecánica cuántica en todas sus posibilidades para lograr exactitud, es decir, concordancia con la realidad, que no es lo mismo que precisión, que se refiere lo numérico y la reproducibilidad de los cálculos. El punto general de partida es la teoría cuántica de muchos cuerpos, sin embargo todos estos

Métodos están confinados a sistemas pequeños. Más exactos, pero también para unas pocas decenas de átomos, son los métodos de la química cuántica. Los electrones se tratan cuánticamente, pero el núcleo se analiza con métodos ab initio como la dinámica molecular (enfoque de Carr-Parrinello), basado en la teoría de la Función de densidad, este es uno de los “métodos del estado de arte”, como también lo es el enfoque de Hartree- Fock (HF), un procedimiento iterativo que permite calcular la mejor solución a la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo, para moléculas aisladas, tanto en su estado fundamental como en estado excitado. La interacción de un único electrón en un problema de muchos cuerpos con

El resto de los electrones del sistema se aproxima promediándolo como una interacción entre dos cuerpos. De esta forma se puede obtener una aproximación a la energía total de la molécula. Como consecuencia, calcula la energía de intercambio de forma exacta, pero no tiene en absoluto en cuenta el efecto de la correlación electrónica.^{53, 54}

A veces estos métodos están libres de parámetros, cuando no utilizan información empírica, como es el caso de la Aproximación de la Densidad Local, en tanto que los métodos semiempíricos son simplificaciones de la FD a la HF. Es decir, se utilizan métodos de enlace fuerte que son menos exactos. La falta de tratamiento cuántico en el núcleo para las condiciones ambientales no es tan crucial, sin embargo, para muchos materiales blandos y para los catalizadores la presencia de hidrógeno es problema serio. Más recientemente han

emergido nuevas aproximaciones con la combinación de la dinámica molecular y la función de densidad con un tratamiento cuántico completo del núcleo del hidrógeno.

Otro método semiempírico es el de la Termodinámica Informática que mezcla cálculos fundamentales *ab initio* con información empírica para obtener funciones termodinámicas y diagramas de fase.⁵⁵

Estos enfoques forman una base indispensable para la investigación que requiere distinguir grupos químicos específicos, como los catalizadores, las vías catalíticas. Las interacciones específicas de átomos o moléculas con las superficies, la reactividad, el crecimiento de cristales, la corrosión, las propiedades vibracionales de sistemas anisotrópicos o desordenados (como los polímeros o los vidrios) y los efectos cuánticos en los sólidos, para dar algunos ejemplos.

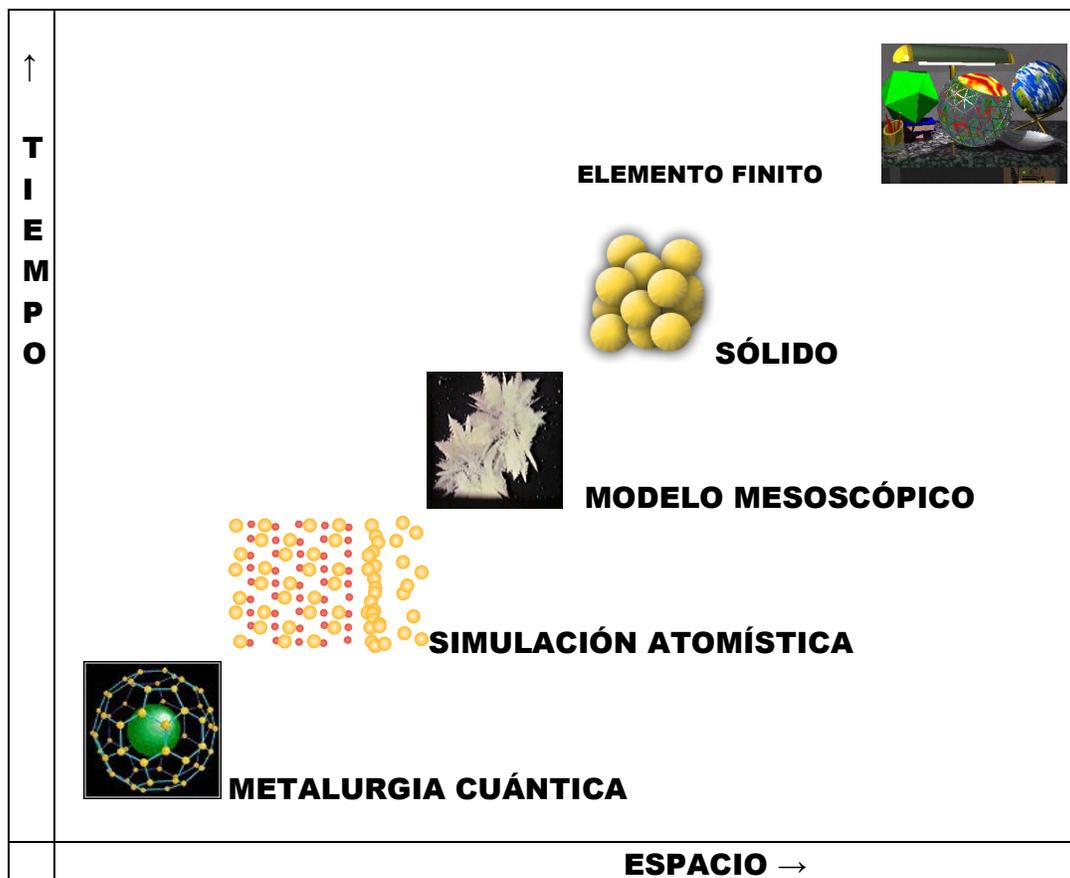


Figura 7. Ilustración de las escalas características para la simulación de metales⁵²

9.4 Cálculos clásicos

Para tratar un número grande de partículas, se necesita una aproximación atomística, que sobrepasa a la descripción completa de un sistema mediante la mecánica cuántica. Es decir, que este nivel se usa lo que se denomina una “descripción clásica”. Sin embargo, los potenciales de interacción (campos de fuerza) se derivan ya sea directamente de los primeros principios de la mecánica cuántica (por ejemplo para las estructuras superficiales) o de una combinación de datos de la química cuántica y datos experimentales. Las aplicaciones corrientes para estas técnicas van desde la física de superficies (crecimiento epitaxial, estructuras laminares, etc.) hasta propiedades estructurales y dinámicas de líquidos y sólidos amorfos, como las mezclas de sistemas moleculares, macromoléculas sintéticas y biológicas, y sistemas no homogéneos con superficies e intercaras complejas. Los sistemas típicos pueden contener hasta 10^4 átomos con tiempos hasta de 1 ns. Para tiempos más largos y unidades estructurales mayores, se han desarrollado esquemas mesoscópicos o genéricos (numéricos). El ejemplo más prominente es la simulación del modelo de Ising por medio del método de Monte Carlo, que ha jugado papel fundamental en la comprensión de las transformaciones de fase.

Para sistemas aún mayores se han desarrollado sistemas semimacrosópicos y macrosópicos. Además del Método del Elemento Finito (MEF), ampliamente usado en ingeniería, han emergido. Esto incluye una unión más cercana entre el MEF y las propiedades moleculares del compuesto y la conexión con el muestreo de Monte Carlo para los materiales compuestos. Otros métodos son las simulaciones hidrodinámicas de la red de Boltzman, dinámica disipativa de partículas (DDP) para hidrodinámica de gran escala como el flujo de líquidos estructurales, la nanorreología (electroforesis, nanoelectrorreología, transporte en arreglos de moléculas). En tanto que los últimos dos ejemplos son técnicas numéricas de partículas, la primera es un enfoque continuo. Entre las dos están muchas otras, como los

métodos de campo autoconsistentes y los sistemas moleculares.⁵⁶

Tradicionalmente estas diferentes áreas de investigación, separadas esencialmente por escalas de espacio o tiempo, han sido investigadas por comunidades diferentes. Se necesita un gran poder de computación para enfrentar estos problemas, pero más importante es el continuo esfuerzo coordinado de químicos, físicos, matemáticos, ingenieros y biólogos. Tal colaboración es absolutamente esencial para lograr el progreso necesario.

10. CONCLUSIÓN

El impacto de la informática en la investigación de materiales se puede observar en el hecho de que, durante el 2003 uno de cada cinco artículos en *Acta Materialia* contenía al menos una de las dos palabras “simulat” o “comput”, mientras que en 1991 era sólo una de cada diez. Ese mismo fenómeno se observa en las universidades de los países desarrollados y en los programas de investigación que allí se impulsan.⁵⁷

Es evidente que en países como el nuestro se está muy atrás en estos aspectos, especialmente por razones de prioridades, pero es importante tener al menos idea de lo que ocurre para ver si se logra avanzar en la enseñanza, la investigación y el desarrollo de materiales vía modelamiento y diseño.

REFERENCIAS

- [1] VALENCIA, ASDRÚBAL. “Los materiales que hacen civilización”, Legado del Saber. Medellín: Universidad de Antioquia, 2003.
- [2] “Los materiales inteligentes”. *Informetal*, No 52, 2003, p. 19.
- [3] “El próximo avance de la Ingeniería: los materiales y las estructuras adaptativas”, *Revista Facultad de Ingeniería, Universidad de Antioquia*, No. 29, Junio de 2003, p. 125.

- [4] “El control de la estructura y las propiedades de los metales”, Seminario Técnico I. Ingeniería de Materiales, Universidad de Antioquia, 1999.
- [5] DAVID, D. J. AND ASHOK MISRA. *Relating Materials Properties to Structure*, New York: CRC Press, 2001, p. 43.
- [6] VALENCIA, ASDRÚBAL. “La materia fina”. *Informetal*, No 53, 2004, p. 15.
- [7] “¿Y qué es la estructura?”, II Encuentro Nacional de Materiales ‘Módulo Metales’. Medellín: Universidad de Antioquia, Noviembre 2006.
- [8] Una aproximación a la ingeniería. Medellín: Universidad de Antioquia, 2003, p. 111.
- [9] SMITH, C. S. *A Search for Structure*. Cambridge: MIT Press, 1981, p. 21.
- [10] EL-MAGD, ESSAM. “Modelling and Simulation of Mechanical Behavior”, *Modelling and Simulation for Material Selection and Mechanical Design*. Totten, George E., Lin Xie and Kiyoshi Funatani (eds.), CRC Press, New York, 2003.
- [11] ASKELAND, DONALD R. *The Science and Engineering of Materials*. Boston: PWS Publishing Co., 1989, p. 16.
- [12] OLSON, G. B. “Materials Design: an Undergraduate Course”, *Design Education in Metallurgical and Materials Engineering*, Schlesinger, M. E. and D. E. Mikkola (eds.). Warrendale PA: The Minerals, Metals and Materials Society, 1993, p. 174.
- [13] “El diseño de nuevos aceros”, *Rev. R. Acad. Cien. Exact. Nat. (Esp.)*, Vol. 90, No. 2, 1996, p. 107.
- [14] ASHBY, MICHAEL F. AND DAVID R. H. JONES. *Engineering Materials*. Oxford: Butterworth Heinemann, 1998, p. 3.
- [15] ASHBY, MICHAEL F. “On the Engineering Properties of Materials”, *Acta Metallurgica*, Vol. 37, No. 5, 1989, p. 1273.
- [16] PERO-SANZ ELORZ, JOSÉ ANTONIO, *Ciencia e Ingeniería de Materiales*, Madrid: Dossat, 2000, p. 579.
- [17] ELICES CALAFAT, MANUEL. “El diseño de materiales”, *Rev. R. Acad. Cien. Exact. Nat. (Esp)*, Vol. 90, No. 2, 1996, p. 75.
- [18] MAILHIOT, CHRISTIAN. “Materials by Computer Design: An Introduction”, *Energy and Technology Review*, September – October, 1994, p 1.
- [19] PORTER, D. “Multiscale modelling of structural materials”, *Multiscale materials modelling: Fundamentals and applications*, Z Xiao Guo (ed.). Cambridge: Woodhead Publishing Ltd., 2007, p. 332.
- [20] MIRANDA, RODOLFO. “Ingeniería de materiales a escala atómica”, *Rev. R. Acad. Cien. Exact. Nat. (Esp)*, Vol. 90, No. 2, 1996, p. 239.
- [21] CEDER, G. ET AL. “Identification of cathode materials for lithium batteries guided by first principles calculations”, *Nature*, Vol. 392, 16 april, 1998, p. 694.
- [22] M ŠOB, MASARYK. “The role of ab initio electronic structure calculations in multiscale modelling of materials”, *Multiscale materials modelling: Fundamentals and applications*, Z Xiao Guo (ed.). Cambridge: Woodhead Publishing Ltd., 2007, p. 11.
- [23] JOHANNESSON, G. H. ET AL. “Combined electronic structure and evolutionary search approach to materials design”. *Physical Review Letters*, vol. 88, No. 25, 24 june 2002, p. 255506-1.
- [24] BERNHOLC, JERZY. “Computational Materials Science: The Era of Applied Quantum Mechanics”, *Physics Today*, September, 1999, p. 30.

- [25] HARRISON, N. M., "An Introduction to Density Functional Theory", Computational Materials Science, Richard Catlow and Eugene Kotomin (eds.). Amsterdam: IOS Press, 2003, p. 45.
- [26] ALBE, K., P. ERHART, AND M. MULLER. "Analytic Interatomic Potentials for Atomic-Scale Simulations of Metals and Metal Compounds: A Brief Overview", Integral Materials Modeling: Towards Physics-Based Through-Process Models, Gunter Gottstein (ed.). New York: John Wiley, 2007, p. 211.
- [27] GRAAF, DE COEN, CARMEN SOUZA AND FRANCES ILLAS. "Quantum Chemical Approach to Excited States in Materials Science", Computational Materials Science, Richard Catlow and Eugene Kotomin (eds.), Amsterdam: IOS Press, 2003. p.167.
- [28] FRANCESCHETTI, ALBERTO AND ALEX ZUNGER. "The inverse band structure problem of finding an atomic configuration with given electronic properties", Nature, Vol 402, 4 November, 1999, p. 60.
- [29] CEDER, G. ET AL. "Identification of cathode materials for lithium batteries guided by first principles calculations", Nature, Vol. 392, 16 april, 1998, p. 694.
- [30] Noticias de la Ciencia y la Tecnología. No. 232, 2 de agosto, 2002.
- [31] VALENCIA, ASDRÚBAL. "Los avances en la metalurgia física", Dyna, No. 140, 2003, p. 46.
- [32] MOYA, J. S. AND S. DE AZA. "Equilibrium diagrams. A tool for designing new ceramics", Science Ceramics, Vol. 14, 1988, p. 27.
- [33] FISHER, C. A. "Theory, Simulation and Design of Advanced Ceramics and Composites", European White Book on Fundamental Research in Materials Science. Stuttgart: Max Planck-Institute für Metallforschung, 2006, p. 138.
- [34] LLIEOTT, J. A. "Monte Carlo and Molecular Dynamics", Introduction to materials modelling, Barber, Zoe (ed.). London: Maney Publishing Co., 2005, p. 100.
- [35] MUÑOZ-ESCALONA, ALFONSO. "Diseño molecular de nuevos materiales poliméricos", Rev. R. Acad. Cien. Exact. Nat. (Esp.), Vol. 90, No. 2, 1996, p. 85.
- [36] GAO, H. "Modelling Strategies for Nano- and Biomaterials", European White Book on Fundamental Research in Materials Science. Stuttgart: Max Planck-Institute für Metallforschung, 2006, p. 144
- [37] GALLI, GIULIA AND FRANCOIS GYGI. "Optimized materials from first principles simulations: are we there yet?", Journal of Physics, Conference Series, (16), 2005, p. 220.
- [38] GALLI, G. "Large-Scale electronic structure calculations using linear scaling methods", Phys. Stat. Sol., 2000, p. 217.
- [39] EDWARD, K. L. "Unifying materials design engineering: A review of the last two decades", Materials & Design, Vol. 17, No. 3, 1996, p. 119.
- [40] THORNTON, K. AND MARK ASTA,. "Current status and outlook of computational materials science education in the US", Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering, Vol. 13, 2005, p. R53.
- [41] PETTIFOR, D. G. "Computer-aided materials design: bridging the gaps between physics, chemistry and engineering", Physics Education, No. 32, 1997, p. 164.
- [42] ROSEN, WALTER. "Materials by Design", ASTM Standardization News, October, 1987, p. 40.
- [43] MORRISON, ALISTAIR. "Learning materials design methodology", Management Development Review, Vol. 5, No. 1, Feb 1992.

- [44] FINNIS, MIKE. Interatomic Forces in Condensed Matter, Oxford: Oxford University Press, 2004, p. 16.
- [45] STONEHAM, MARSHALL. "Model solutions? The status of materials modelling", Europhysics News, Vol. 31, No. 7, 2001, p. 1.
- [46] BRISTOWE P. D. AND P. J. HANSIP. "General Aspects of Materials Modelling", Introduction to materials modelling, Barber, Zoe (ed.). London: Maney Publishing Co., 2005, p. 9.
- [47] RÜHLE, M. "Materials Theory and Modelling", European White Book on Fundamental Research in Materials Science. Stuttgart: Max Planck-Institute für Metallforschung, 2006, p. 126.
- [48] STONEHAM, MARSHALL. Predictive Modelling of Materials", European White Book on Fundamental Research in Materials Science. Stuttgart: Max Planck-Institute für Metallforschung, 2006, p. 130.
- [49] TIN, S. AND H. K. D. H. BHADESHIA. "Finite Elements", Introduction to materials modelling, Barber, Zoe (ed.). London: Maney Publishing Co., 2005, p. 122.
- [50] SWADDIWUDHIPONG, S., HUA, J., THO, K. K. AND LIU S. Z. "Finite element modelling for materials with size effect", Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering, Vol. 14, 2006, p. 1127.
- [51] STONEHAM, MARSHALL ET AL., Predictive modelling of materials in the UK. London: Foresight, 2001.
- [52] KREMER, K. "From Basic Principles to Computer Aided Design", European White Book on Fundamental Research in Materials Science. Stuttgart: Max Planck-Institute für Metallforschung, 2006, p. 134.
- [53] COTTRELL A. H. "Modelling of Electronic Structure", Introduction to materials modelling, Barber, Zoe (ed.). London: Maney Publishing Co., 2005, p. 24.
- [54] HANSIP, P. J. "Advanced Atomistic Modelling", Introduction to materials modelling, Barber, Zoe (ed.). London: Maney Publishing Co., 2005, p. 40.
- [55] BHADESHIA, H. K. D. H. "Thermodynamics", Introduction to materials modelling, Barber, Zoe (ed.). London: Maney Publishing Co., 2005, p. 72.
- [56] BULATOV, VASILY AND WEI CAI. Computer Simulations of Dislocations. Oxford, University Press, 2006, p. 56.