

Diseño de materiales a la medida: ¿sueño o realidad?

Resumen

Actualmente, gracias al enorme avance científico experimentado en el último siglo en el área de la física, la química y la ciencia de los materiales, por primera vez es posible diseñar y construir materiales con propiedades determinadas, para fines específicos. En este artículo revisaremos la primera parte de ese proceso, esto es, el diseño teórico de materiales, describiendo algunos de los ingredientes básicos que han hecho posible esta verdadera revolución en la ciencia de los materiales. Comenzamos por una revisión de la estructura de la materia para luego describir someramente los métodos de cálculo computacional que permiten la comprensión y predicción de ciertas propiedades de los materiales.

Introducción

La historia de la civilización, desde sus orígenes hasta nuestros días, es en gran medida la historia del mejoramiento de los medios materiales de vida. Esta afirmación se comprende mejor cuando se analizan los esfuerzos hechos por la humanidad para aprovechar las materias primas que le brinda la naturaleza y ocuparlas en su beneficio. En este contexto, un papel central lo constituye el esfuerzo por producir y obtener materiales con cada vez mejores propiedades para su uso en construcción, ingeniería, confección de artefactos domésticos, etc. No es casualidad que las distintas etapas de la civilización se nombren por medio de los materiales utilizados prioritariamente por el hombre durante ciertos períodos. Así encontramos la Edad de Piedra, seguida por la Edad del Bronce y la Edad del Hierro. A esto podríamos agregar la moderna Edad del Acero, que data desde mediados del siglo XIX, y en la actualidad la Edad del Silicio, a partir de su profusa aplicación en microelectrónica desde el año 1960.

Este proceso de búsqueda de materiales con determinadas propiedades mecánicas, térmicas, eléctricas, magnéticas u ópticas, por nombrar algunas, ha transitado desde una etapa inicial donde se hacía uso del material encontrado en su estado natural hasta una etapa actual de procesamiento y elaboración de él mediante técnicas muy sofisticadas, que se sustentan en el conocimiento y estudio sistemático tanto en el plano experimental como teórico.

Naturalmente, en épocas remotas el interés principal del hombre era satisfacer sus necesidades materiales inmediatas -hacer una buena punta de flecha o un cuchillo firme- y no estaba en condición de hacer “investigación científica”, sino que comenzó directamente por la aplicación. Así, los primeros metalúrgicos que fundieron mineral de cobre hace unos 7000 años tal vez eran incapaces de distinguir entre un óxido o un sulfuro, pero sí sabían buscar y utilizar muy bien las vetas del mineral que les proporcionaban cobre metálico. Posteriormente vino un desarrollo más sistemático, se aprendió a distinguir distintos elementos y a combinarlos entre sí para producir materiales con mejores propiedades, de acuerdo a las necesidades. Esto permitió obtener reglas empíricas de mezclas y métodos de producción, muchos de los cuales son usados hasta el día de hoy. Estas reglas empíricas, a su vez, sirvieron como base para desarrollar las teorías científicas en el campo de la física y de la química que constituyen los pilares fundamentales de la actual ciencia de los materiales. Este desarrollo ha

Cuadro 1. La Tabla Periódica de los Elementos, una ley fundamental de la naturaleza

Tabla Periódica de los Elementos

1 H																	2 He
3 Li	4 Be											5 B	6 C	7 N	8 O	9 F	10 Ne
11 Na	12 Mg											13 Al	14 Si	15 P	16 S	17 Cl	18 Ar
19 K	20 Ca	21 Sc	22 Ti	23 V	24 Cr	25 Mn	26 Fe	27 Co	28 Ni	29 Cu	30 Zn	31 Ga	32 Ge	33 As	34 Se	35 Br	36 Kr
37 Rb	38 Sr	39 Y	40 Zr	41 Nb	42 Mo	43 Tc	44 Ru	45 Rh	46 Pd	47 Ag	48 Cd	49 In	50 Sn	51 Sb	52 Te	53 I	54 Xe
55 Cs	56 Ba	57 La	72 Hf	73 Ta	74 W	75 Re	76 Os	77 Ir	78 Pt	79 Au	80 Hg	81 Tl	82 Pb	83 Bi	84 Po	85 At	86 Rn
87 Fr	88 Ra	89 Ac	104 Rf	105 Db	106 Sg	107 Bh	108 Hs	109 Mt	110 Uun								

58 Ce	59 Pr	60 Nd	61 Pm	62 Sm	63 Eu	64 Gd	65 Tb	66 Dy	67 Ho	68 Er	69 Tm	70 Yb	71 Lu
90 Th	91 Pa	92 U	93 Np	94 Pu	95 Am	96 Cm	97 Bk	98 Cf	99 Es	100 Fm	101 Md	102 No	103 Lr

 Metales alcalinos	 Metales alcalinos terreos	 Metales de transición	 Metales de tierras raras
 Otros metales	 Gases nobles	 haluros	 Otros no metales

El gran físico Richard Feynman decía que si algún cataclismo destruyera todo el conocimiento científico y solamente se pudiera heredar una frase a la generación sobreviviente, él elegiría esta: “*todas las cosas están formadas por átomos –pequeñas partículas que se mueven con movimiento perpetuo, atrayéndose unas a otras cuando están separadas por una pequeña distancia, pero repeliéndose cuando se las trata de apretar una contra otra*”. Para Feynman, esta es la frase que contiene el máximo de información con el mínimo de palabras. La Tabla Periódica de los Elementos, debida a Mendeleev, dice además cuales son esos átomos, no más de 110, y ordena en una misma columna aquellos que tienen características químicas similares. Ahora sabemos también que los átomos están formados por electrones, neutrones y protones. Estos últimos definen el número atómico, que no puede ser superior a 130. A medida que se avanza por una fila de izquierda a derecha crece el número atómico y cambian las características químicas de los elementos, hasta llegar a un punto en que todo comienza a repetirse, pero con un número atómico superior.

llegado a tal punto que actualmente es posible plantearse y resolver en forma científica el problema de diseñar, elaborar y construir un material con características específicas.¹ Uno de los desafíos que existe hoy en el área de la física de los sólidos y la ciencia de los materiales es el de dar respuesta a preguntas del siguiente tenor: ¿es posible, a partir del conocimiento de los 110 elementos que forman la tabla periódica (ver Cuadro 1), de las leyes que rigen a cada uno de esos átomos y sus reglas de combinación, diseñar un material que tenga una densidad de 3.0 g/cm³, que sea aislante, de color azul y que sea más duro que el diamante? Por supuesto, en términos prácticos, diseñar teóricamente no es suficiente, sino que también hay que saber luego como producir ese material, lo que requiere poseer técnicas experimentales y trabajo de laboratorio adecuado para ello. Sin embargo, si la teoría pudiera responder a este tipo de preguntas ya sería un enorme progreso.

¹ No está de más recordar que este era precisamente uno de los objetivos buscados por los antiguos alquimistas, y al cual Newton dedicó tanto o más esfuerzo que a los *Principia* de la Mecánica.

En lo que sigue, describiremos cuales son los ingredientes básicos que han hecho posible esta verdadera revolución en el área de ciencia de los materiales, empezando por una revisión sobre la estructura de la materia, para luego comentar los métodos de cálculo computacional necesarios para entender y predecir las propiedades de un material.

Las escalas de tamaño: de lo macroscópico a lo electrónico

Una legítima aspiración de alguien que trabaje en el área de materiales es ser capaz de predecir en forma confiable el comportamiento de éstos en una amplia escala de tamaños y tiempos (ver Figura 1). Consideremos un ejemplo concreto: supongamos que tenemos un poste metálico que soporta una antena. De este poste nos gustaría conocer, o poder calcular, propiedades macroscópicas generales, tales como su resistencia mecánica, su flexibilidad, los cambios que sufre debido a la temperatura y el tiempo que puede resistir una determinada fuerza externa. Pero además, también interesa conocer propiedades tales como la resistencia a la corrosión o su actividad química, que dependen directamente de cuales y cómo están dispuestos los átomos y moléculas que componen el poste; es decir, propiedades a escala atómica. Así, para conocer las propiedades de un material en su conjunto, necesitamos estudiarlo en sus distintas escalas de tamaño y

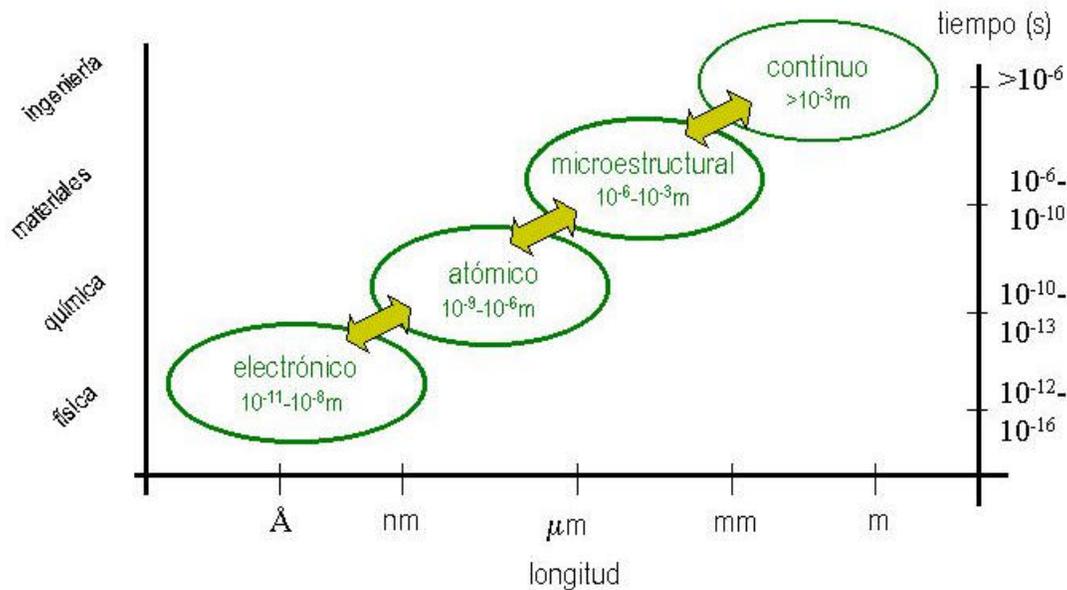


Figura 1. Un material según su tamaño, se puede clasificar en un nivel continuo o macroscópico, luego un nivel microscópico, luego el nivel atómico, y finalmente el nivel electrónico. En cada uno de estos niveles los procesos físicos tienen una longitud y un tiempo característico, y existe una disciplina particular que los estudia.

tiempo, empleando en cada una de ellas las teorías que sean adecuadas. En la Figura 1 se muestra un esquema de los diferentes niveles de organización de un material, que va desde los electrones y protones, pasando por el nivel atómico, luego microscópico hasta llegar al nivel continuo o macroscópico. En cada uno de estos niveles de complejidad hay procesos físicos que ocurren a tiempos y longitudes características, señaladas en los ejes del gráfico, y que están descritos por leyes y teorías correspondientes. De igual modo, se señalan las disciplinas que prioritariamente se encargan del estudio en cada escala de tamaño.

Cálculo de las propiedades físicas

Examinemos ahora con mayor detalle estas escalas de tamaño y los métodos de cálculo empleados en cada una de ellas, desde el nivel macroscópico al electrónico.

El **nivel continuo o macroscópico** se refiere a dimensiones de escala humana: metros y segundos. En esta escala un material se considera como una sustancia homogénea, continua, cuyas propiedades son la expresión macroscópica de agregados más pequeños. Las leyes que rigen acá son las de la física clásica (ver Cuadro 2), por ejemplo las teorías de hidrodinámica y elasticidad, que se expresan mediante ecuaciones en derivadas parciales. Un ejemplo de esto es la determinación de la pérdida de calor a través de una pared. Conociendo datos del problema tales como la conductividad térmica, capacidad calórica, espesor de la pared y la temperatura a la cual está, sólo basta resolver la Ecuación del Calor para obtener la respuesta, lo que generalmente se hace en forma numérica con la ayuda de un computador, ocupando técnicas de elementos finitos o diferencias finitas. Es en este nivel macroscópico en el cual trabajan las diferentes disciplinas convencionales de la ingeniería, ya sea mecánica, eléctrica o civil.

Si ahora ponemos una lupa con aumento de unas 10 000 veces sobre esta pared veremos que ella está formada por granos de **dimensiones microscópicas** (10^{-6} m), que aunque están uniformemente distribuidos, el orden se ve interrumpido por irregularidades tales como grietas, bordes de granos, dislocaciones u otro tipo de defecto. Estos granos tienen dinámica propia y su ordenamiento resulta de fundamental importancia para ciertas propiedades del material, tales como la dureza. Por ejemplo, las excelentes propiedades mecánicas de la aleación níquel-aluminio (un compuesto intermetálico de Ni-Al) usada en los álabes de las turbinas de avión están directamente relacionadas con su microestructura. Esta *super*-aleación consiste de bloques cúbicos de Ni_3Al completamente ordenados, inmersos en una matriz de Ni_3Al desordenado, donde los átomos de níquel y aluminio están distribuidos al azar. La gran resistencia mecánica que presenta esta aleación a altas temperaturas, con la propiedad de ser más firme conforme ésta aumenta, se debe precisamente a la presencia de la fase ordenada del intermetálico Ni_3Al . Las siguientes etapas que encontramos al explorar tamaños más pequeños son el nivel atómico y el nivel electrónico. Su entendimiento fue posible sólo partir del siglo XX, con la invención de la Mecánica Cuántica (ver Cuadro 3). Por la importancia de estos niveles y el desarrollo que se ha alcanzado en el cálculo de propiedades atómicas y electrónicas en los materiales, los veremos con mayor detalle en lo que sigue.

Cuadro 2. La física clásica, el legado del siglo diecinueve.

El siglo diecinueve fue un período de grandes avances y síntesis en las ciencias físicas, dejando firmemente establecidas tres grandes áreas que hoy se conocen bajo el nombre genérico de física clásica: la mecánica, la electrodinámica y la termodinámica.

Mecánica clásica Gracias a los trabajos de Lagrange, Hamilton y Poincaré, la mecánica de Newton se reformuló de manera más general y poderosa, creando un cuerpo teórico que integró áreas que hasta entonces se habían desarrollado de manera independiente, tales como la cinemática y dinámica de la partícula, la mecánica del sólido rígido, la mecánica celeste, la acústica y la mecánica de fluidos.

Electrodinámica y Teoría Electromagnética de la Luz La segunda gran síntesis de debió al genio de J. C. Maxwell, quien basado en los trabajos de Faraday, Oersted y Ampere, entre otros, unificó fenómenos que hasta entonces se estudiaban como ramas independientes: la electricidad, el magnetismo y la óptica, dando origen al electromagnetismo. Escribió las ecuaciones que relacionan los campos eléctricos y magnéticos, demostró que la luz era radiación electromagnética y predijo teóricamente la posibilidad de generar ondas electromagnéticas en otras frecuencias, como las ondas de radio.

Termodinámica y Mecánica Estadística Se logró esclarecer que el calor no es sino otra forma de energía y se cuantificó la posibilidad de convertirlo en trabajo mecánico, mediante la formulación del concepto de entropía. Así quedaron establecidas las tres leyes de la termodinámica que gobiernan los fenómenos térmicos y las transformaciones que sufren los cuerpos debido a los cambios de temperatura. La potencia de esta teoría reside en que es totalmente general, en el sentido que no hace referencia a características muy específicas ni a la composición microscópica de la materia.

Pero hay más: no conforme con eso, se buscó una explicación microscópica a los fenómenos térmicos. Se creó la teoría cinética de los gases, basados en la evidencia experimental que los gases y todos los materiales en general, están formados por partículas, o átomos, que son los ladrillos fundamentales con los cuales se construye el resto. La pregunta natural que surgía era: dado que todos los cuerpos obedecen a la ley de movimiento de Newton, ¿que pasa si aplicamos tales leyes al movimiento de las partículas que componen un gas? ¿recuperaremos las leyes de la termodinámica? Este formidable programa de trabajo fue abordado por Boltzmann, Maxwell y Gibbs, dando origen a la Mecánica Estadística.

Nivel atómico

En este **nivel** se considera a los átomos como bolitas, y la compleja interacción entre protones y electrones se modela por medio de una fuerza efectiva entre los átomos. De aquí resulta aquella clasificación tradicional de los materiales en términos del tipo de fuerza o enlace químico que los mantiene cohesionados: enlace iónico, enlace covalente, enlace metálico, enlace puente de hidrógeno y enlace van der Waals. Por ejemplo, en este esquema, los sólidos nobles (Neón, Argón, Kriptón), corresponden al enlace tipo van der Waals y se modelan mediante una fuerza interatómica muy simple, el llamado potencial de Lennard-Jones, logrando las predicciones teóricas de este modelo un acuerdo notable con las propiedades medidas experimentalmente.

Las técnicas de simulación computacional más usadas para modelar un sistema a nivel atómico son la Dinámica Molecular (DM) y el Método de Montecarlo (MC). Estos métodos pueden considerarse como algoritmos para mover los átomos de acuerdo a las condiciones físicas del problema, simulando de ese modo lo que ocurre en el material real bajo esas condiciones. En ambos métodos se colocan los átomos en una posición inicial determinada, con las condiciones físicas externas deseadas (número de partículas, temperatura, presión, etc). Estas partículas (o átomos) interactúan mediante un potencial interatómico específico al sistema a simular (por ejemplo, potencial de Lennard-Jones si se trata de gases nobles). En el caso de DM el sistema se hace evolucionar en el tiempo siguiendo la segunda Ley de Newton, con lo que obtenemos las posiciones en función del tiempo, $x_i(t)$, y las velocidades en función del tiempo, $v_i(t)$, para cada una de las

Cuadro 3. La Mecánica Cuántica, una gran creación del siglo veinte.

A fines del siglo XIX los físicos estaban orgullosos de lo que habían logrado. Prácticamente todos los fenómenos conocidos podían ser explicados y estaban contenidos en un cuerpo teórico preciso. Sólo dos nubes se aparecían amenazantes en ese claro horizonte: i) existía una contradicción entre las leyes de la mecánica y las de la electrodinámica, y ii) había nuevos hechos observados, a nivel atómico, que no tenían explicación en el marco de las teorías existentes. Ambos “detalles” resultaron ser cruciales, y fueron resueltos con la Teoría de la Relatividad y la Mecánica Cuántica, respectivamente

Así como la Mecánica Clásica establece las leyes del movimiento de los cuerpos macroscópicos, la Mecánica Cuántica es la teoría que predice el comportamiento de la materia a nivel atómico y molecular. Los años 1925-28 marcan el nacimiento de la Mecánica Cuántica, gracias a los trabajos decisivos de Schrödinger, Heisenberg, Born, Jordan, Pauli y Dirac, entre varios otros. Esta teoría significa un salto revolucionario respecto de la Mecánica Clásica. En Mecánica Cuántica ya no existe el concepto de trayectoria, y todas las propiedades de una partícula están contenidas en el llamado vector de estado $|\psi\rangle$, el cual obedece a la Ecuación de Schrödinger, que se puede entender como el equivalente a la Ecuación de Newton para los fenómenos atómicos. Mediante la Mecánica Cuántica se pudo explicar los espectros atómicos, la tabla periódica de los elementos, el enlace químico, el color de los cristales y muchas otras propiedades de los materiales. Es una teoría bastante abstracta y poco intuitiva, llena de sorpresas e implicaciones filosóficas no triviales, pero entrega resultados tan sorprendentes como precisos. En términos prácticos ha sido extremadamente fecunda, siendo la responsable de la gran mayoría de los adelantos en electrónica, óptica, comunicaciones y computación que vemos hoy día.

Por ejemplo, gracias a la Mecánica Cuántica sabemos que los cuatro electrones de valencia del átomo de carbono (C) pueden formar híbridos de estructura tetraédrica, que enlazados entre sí dan origen a la estructura del diamante, donde cada C está enlazado con otros cuatro C, formando una red extremadamente dura.

Para conocer las propiedades de un material macroscópico a nivel electrónico existen varias técnicas experimentales, tales como fotoemisión de electrones o microscopía de efecto túnel, entre otras. En el plano teórico, debemos hacer lo que se llama un cálculo de estructura electrónica. Este consiste en resolver la ecuación de Schrödinger para el sistema en estudio. Como generalmente estos sistemas contienen un número extremadamente grande de átomos (y por tanto de electrones), esta tarea es imposible de hacer en forma exacta y debemos recurrir a aproximaciones. Cuando se trata de un sólido cristalino se puede simplificar el problema y resolver la Ecuación de Schrödinger sólo para un número pequeño de ellos (menos de 100 átomos), pero aún así ésta es una tarea formidable.

Afortunadamente, gracias a la Teoría del Funcional de la Densidad creada por Kohn y sus colaboradores en los años sesenta, y desarrollada vigorosamente en las décadas de los ochenta y noventa, se logró simplificar las ecuaciones a resolver. Esta Teoría propone un esquema de cálculo razonablemente sencillo y preciso, que permite su codificación en programas computacionales que pueden correrse incluso en computadores personales. Actualmente existe una gran variedad de estos programas computacionales que permiten hacer cálculos de estructura electrónica para sistemas simples bajo el esquema de la Teoría del Funcional de la Densidad cuyos resultados presentan un excelente acuerdo con los experimentos.

Calculando en todos los tamaños a la vez

La clasificación de los materiales presentada anteriormente no es por supuesto la única ni la mejor posible, sino sólo la más usada hasta ahora. Naturalmente, no se puede hablar de una división estricta en tamaños ni de teorías que se aplican en uno u otro nivel. Lo que se tiene en la realidad es más bien un todo, un continuo, donde sólo se puede hablar de énfasis diferentes en las distintas escalas de tamaño y a veces ni siquiera de eso. Efectivamente, uno de los frentes de trabajo más intensos hoy día en el área de simulación de materiales es el de encontrar una forma eficiente y precisa de calcular las propiedades de un material en todas las escalas de tamaños de manera simultánea. Esto se debe a que hay problemas tan importantes como el de la fractura de materiales o el proceso de fusión (transición de sólido a líquido), por nombrar sólo dos, en los cuales no es posible desacoplar las distintas escalas de longitud, pues todas intervienen de manera importante simultáneamente.

En el mismo sentido, señalemos que existe una escala de tamaños en la cual se han descubierto fenómenos que no tienen una explicación convincente en el marco de las teorías actualmente existentes y para los cuales no hay aún conceptos adecuados que los describan: se trata de los tamaños que van desde los 10^{-6} m (nivel microscópico) a los 10^{-9} m (nivel atómico) y que se denomina el nivel **nanoscópico**. La continua miniaturización de los componentes electrónicos (chips, procesadores, memorias, etc.) es la principal responsable de la investigación que se realiza a nivel nanoscópico. Actualmente se ha alcanzado una etapa de desarrollo tal, que es posible manipular átomos uno por uno y colocarlos prácticamente donde se quiera. El desarrollo de las técnicas experimentales que han hecho esto posible (microscopía de efecto túnel, microscopía de fuerza atómica, crecimiento epitaxial de cristales, por nombrar algunas) ha dado origen a lo que se conoce con el nombre de **nanotecnología**. En este caso no es posible separar los niveles atómicos y microscópicos, sino que debemos tratarlos en conjunto, desarrollando esquemas de cálculo que permitan resolver con la mayor exactitud posible las ecuaciones involucradas en sistemas físicos que tienen una inmensa cantidad de átomos (del orden de 10^{12} átomos). La gran potencia computacional que hoy día existe es insuficiente y tal vez se requiera también desarrollar conceptos físicos y esquemas de cálculo completamente nuevos.

Conclusión

Los conceptos físicos y los métodos de cálculo que permiten entender, y por tanto prever, lo que ocurre en un material en sus distintas escalas de tamaño bajo condiciones externas determinadas no están desarrollados todavía. Sin embargo, gracias a los avances en el plano experimental, en el plano teórico, y en el plano de la simulación computacional, hoy se comienza a ver como posible el sueño de diseñar y construir materiales hechos a la medida de necesidades específicas. Ciertamente, esto no es sólo privativo de ciencia de materiales, sino que está ocurriendo también en otra áreas, como biología, genética y química. En particular, una revolución similar se vive en la industria farmacéutica, donde por primera vez estamos a la puertas de poder diseñar y sintetizar remedios con fines específicos.

Agradecimientos.

El autor agradece al Proyecto Fondecyt 1010126 y al Núcleo Milenio ICM-P99-135-F. Una versión de este artículo, ligeramente más técnica, apareció publicada bajo el título “Materiales hechos a la medida: ¿sueño o realidad?”, en la revista *Charlas de Física* 17, de la Facultad de Ciencias, Universidad de Tarapacá, Arica, <http://www.uta.cl>

Para saber más:

1. J. Roessler y G. Salazar, *Estructura de la Materia*, Revista Creces, <http://www.creces.cl>
2. M. Molina, *Nanotecnología*, Boletín Sochifi, Abril 2002, <http://www.sochifi.cl>
3. Página web sobre nanotecnología: www.nanotechweb.org
4. P. Vashishta et al, *Computer Simulation of Materials using Parallel Architectures*, Computational Materials Science, Vol. 2, 180 (1994).
5. J. Bernholc, *Computational Materials Science: The era of Applied Quantum Mechanics*, Physics Today, 30, (1999).

Gonzalo Gutiérrez
Departamento de Física,
Universidad de Santiago de Chile.
<http://fisica.usach.cl/~gguetierr>
gguetierr@lauca.usach.cl

Santiago, Marzo 2003