

*Krzysztof Parliński***Modelowanie materiałów i przewidywanie ich właściwości**

Modelowanie materiałów odbywa się za pomocą znanych narzędzi, będących częścią praktyki inżynierskiej. Szczególnie znane są metody elementów skończonych i obliczeniowa dynamika cieczy. Jednakże aktualne modelowanie materiałów idzie znacznie dalej. Obliczenia struktury elektronowej pozwalają zaproponować cemeny z określonym czasem twardnienia lub pożądane właściwości piezoelektrycznych transducerów. Badania na poziomie atomowym pozwalają przewidzieć prawidłowe działanie katalizatorów, czy też zachowanie się paliwa nuklearnego w warunkach ekstremalnych. Ilościowy opis struktury w mesoskali i zrozumienie tworzenia się takiej struktury umożliwia udoskonalenie polimerów, tekstury lodów i barier termicznych warstw ochronnych. Jeden z takich obszarów aktywności, będący komercyjnie wykorzystywany, stanowi użycie ilościowej termodynamiki, kinetyki i statystyki modelującej produkcję stopów z podwyższonymi parametrami i poprawioną powtarzalnością.

Pojęcie modelowania materiałów ma obecnie bardzo wiele znaczeń. Nie jest to fizyka ciała stałego, z wyjątkiem wyprowadzenia metody i jej uzasadnienia. Oprócz takich metod, jak CAD (*computer-aided design*) i metoda elementów skończonych, modelowanie wykorzystuje wielorakie strategie, nie wyłączając z tego metod analitycznych. Ich wykorzystanie i rola w dużej części zależy od zaangażowanego w tematykę przemysłu. Przy projektowaniu leków, struktura i właściwości molekuly są zasadniczym problemem, i w tym obszarze obserwuje się dużą aktywność badawczą i rozwojową. Modelowanie, wytypowanie i wczesna selekcja nowych molekuł są uzasadnione również z ekonomicznego punktu widzenia, ponieważ odkrycia generują też popyt. Jednocześnie istnieje jednak ograniczenie, ponieważ żaden lek nie otrzyma zezwolenia na zastosowanie, jeżeli jest tylko modelowany komputerowo. Tym niemniej modelowanie daje wymierne oszczędności ekonomiczne przy produkcji nowych leków. W zagadnieniach eksploracji przestrzeni kosmicznej jest wiele odkryć, a mniej badań, gdyż dla tej dziedziny rozwiązania są bardziej związane z wieloma technologiami, a mniej z wykorzystaniem pojedynczych wynalazków. Przemysł chemiczny częściej wybiera CFD (*computational fluid dynamics*) i inne narzędzia oparte na ruchu masy i wynikach termodynamicznych.

Przemysł półprzewodników zainteresowany jest zjawiskami deformacji warstw półprzewodzących, procesami towarzyszącymi wzbudzeniu elektronów i gradientów stężeń w ciele stałym. Wymagania przemysłowe doprowadziły do powstania tego typu kodów obliczeniowych, które w następstwie wykorzystane zostały do modelowania materiałowego.

Modelowanie materiałowe rozciąga się od wizualizacji do najnowocześniejszych dokładnych metod wyliczania wartości parametrów. Nie ma jednak uniwersalnej, najlepszej metody: doskonałość modelowania jest wprost proporcjonalna do włożonego wysiłku. Jakie są więc cele modelowania? Zadania zmieniają się w szerokim zakresie i nie ograniczają się do niektórych wcześniej przewidzianych struktur kryształów czy materiałów. Proste właściwości, takie jak moduł sprężystości, cieszyły się skromnym zainteresowaniem. Przemysł natomiast był zainteresowany szczególnie poprawą jakości już istniejących materiałów, a raczej skierowaniem nowych produktów na rynek zgodnie z zapotrzebowaniem, wykorzystując ścisłą współpracę inżynierów z naukowcami. Co więcej, przemysł jest zainteresowany identyfikacją przedsięwzięć, których *nie* należy podejmować z racji negatywnego rezultatu wynikającego z modelowania.

Powstało bardzo wiele programów (softwarów) używanych w nowoczesnym modelowaniu i wykorzystywanych w większości przez uniwersytety. Do czego służą te programy? Popularne jest stosowanie ich do wyznaczania struktur molekularnych i krystalicznych, szczególnie związków organicznych przy badaniu leków lub minerałów pod wysokimi ciśnieniami w celu poznania fizyki Ziemi oraz określenia właściwości elektrycznych, optycznych, oraz drgań cząsteczek i kryształów. Badania materiałów obejmują właściwości oscylacyjne, stałe elastyczne, widma absorpcyjne i przemiany fazowe, elektronowe przerwy energetyczne i ich szerokość, powinowactwo elektronowe i efektywne masy ładunków. Właściwości powierzchni kryształów zawierają zmiany na powierzchni, energię powierzchniową i napięcia powierzchniowe.

Istotne zagadnienie stanowi modelowanie defektów powstających wewnątrz materiałów. Tematyka ta była częściowo wymuszana przez rozwój techniki reaktorów jądrowych. Bardzo dobre wyniki dają wyliczenia właściwości prostych defektów, zawierające modele oparte na siłach międzyatomowych, które mogą być opisane w dynamice molekularnej i pozwalają przewidzieć właściwości termodynamiczne. W półprzewodnikach modelowanie odnosi sukcesy w różnych zagadnieniach. Teoria mas efektywnych charakteryzuje się dużą dokładnością. Jest wiele niewiadomych, szczególnie w zrozumieniu zjawiska dyfuzji w warunkach rzeczywistych dla nowoczesnych, szybkich procesów termicznych. Jest też wiele do zrobienia celem pełnego zrozumienia roli stanów o różnych ładunkach i stanów elektronów wzbudzonych. Dla kryształów metody pseudopotencjałów międzyatomowych dają bardzo dobre wyniki. Właściwości energii powierzchniowej dają się z większą dokładnością wyliczyć niż zmierzyć.

Stanom wzbudzonym w kryształach jonowych poświęcono wiele uwagi z powodu ich ważnej roli w fotografii i innych systemach specjalistycznych. Napotyka się jednakże na rozliczne trudności dla układów nieuporządkowanych, w których pojawiają się jednocześnie problemy energetyczne i kombinatoryczne. Sprzężenie elektron-fonon może zmieniać się od jednego układu do drugiego w sposób

znaczący, z zachowaniem małych polaronów, potrzebnych do zrozumienia zachowania materiałów, począwszy od takich, jak paliwa jądrowe, a skończywszy na tlenkach o gigantycznym magnetooporze. Określając jasno, modelowanie materiałów opisuje ogromną zmienność zachowań, znacząco bardziej różnorodną niż modelowanie leków. Jest to cecha jednocześnie słaba i silna – silna z powodu bogactwa możliwości i wyzwań, a słaba ze względu na ograniczenie zakresu narzędzi i możliwości ich wykorzystania.

Jak wiadomo, moce komputerowe i oprogramowania mają też swoje ograniczenia. Potrzebne jest, aby postawienie problemu oraz interpretacja wyników obliczeń były proste i niedwuznaczne. Najbardziej efektywne modelowanie jest powiązane z obliczeniami na skomplikowanym poziomie. Wiedza i doświadczenie, bardziej niż oprogramowanie, decydują o powodzeniu. Które z tych elementów wydają się zatem najtrudniejsze? Po pierwsze, postawienie zagadnienia tak, aby je można było modelować, znając w przybliżeniu szczegóły i dokładność. Po drugie, poznanie na tyle wydajności modelowania, aby można było dać prawidłową odpowiedź. Po trzecie, należy dowierzać wynikom modelowania, aby móc podejmować niepopularne decyzje. Ważnym jest, aby wcześniej wiedzieć, co może nie działać w modelowaniu.

Na koniec należy wspomnieć o współpracy z odpowiednią ilością specjalistów. Niewystarczająca jest praca jednej osoby nad danym zagadnieniem. Jest ona wówczas w pewnym sensie izolowana, a tym samym ograniczona w wydawaniu odpowiedzialnych ekspertyz i wiarygodnych wyników badań. Bardziej wydajna jest praca małego zespołu, gdyż wówczas ma się znacznie większą pewność, że wyniki modelowania będą wiarygodne.

Modeling of materials and predicting their properties

Abstract

Development of computing technique permitted to create a number of computer programs, which are able to calculate selected parameter's values of molecules, crystals and materials. Some of most known computing methods has been cited, and the advantages of applications of each such computing simulation has been referred.