

# 43 KUNNEN WE NIEUWE MATERIALEN ONTWERPEN OP DE SCHAAL VAN ATOMEN?

*Hoe een materiaal zich in het groot gedraagt, wordt bepaald door hoe het in het klein is opgebouwd. Maar hoe het één tot het ander leidt is vaak niet zo duidelijk. Stel, we willen een nieuw materiaal ontwerpen dat zich precies zo gedraagt als wij nodig hebben. Weten we dan hoe dat materiaal er op de schaal van atomen uit moet zien?*

De vraag kan optreden bij metalen balken die in een constructie de juiste combinatie van hardheid en buigzaamheid moeten hebben. Die eigenschappen worden uiteindelijk bepaald door de atomen waaruit het metaal is opgebouwd, en de krachten die zij op elkaar uitoefenen.

Maar het zelfde geldt voor alle soorten materialen – composietvezels, biomaterialen of iets basaal als stromend water. Zelfs orkanen in de aardse atmosfeer bestaan uiteindelijk uit oneindige hoeveelheden minuscule atomen die krachten op elkaar uitoefenen en zo op enorme schaal in werveling komen.

Materiaalwetenschappers willen het gedrag van materialen in het groot kunnen begrijpen en voorspellen op basis van hoe ze eruit zien op atomaire schaal. Het mooiste zou het zijn als ze gedetailleerde wetmatigheden ontdekken die voor elk type materiaal geldig blijken te zijn.

Dan, als ze zover zouden zijn, hebben ze nóg een droom: die wetten gebruiken om nieuwe materialen, met nauw omschreven eigenschappen, op de tekentafel te ontwerpen, zuiver op basis van de atomen waaruit ze worden opgebouwd.

## **Slimme manier**

Om de relatie tussen verschillende schalen te doorgronden worden rekenmodellen gebruikt. Door op de kleine schaal de krachten tussen vele atomen onderling te berekenen, kan het gedrag van een materiaal op grotere schaal in de computer worden gesimuleerd. Door de voorspelling vervolgens te verifiëren aan de werkelijkheid, kan het model stap voor stap worden verbeterd.

Weer- en klimaatmodellen illustreren de kracht en beperkingen van zulke modellen. Supersnelle computers kunnen het gedrag van de atmosfeer tegenwoordig redelijk

goed voorspellen, maar uiteindelijk is elk model een versimpeling van de werkelijkheid. Het ideale model zou de hele aardatmosfeer opdelen in 'celletjes' van een paar kubieke centimeter, maar geen computer zou in staat zijn die berekening af te krijgen.

In de praktijk moet veel informatie worden weggelaten om de berekening praktisch te houden, maar dat weglaten moet op een slimme manier. 'Multischaalmodellen' gebruiken zulke methodes.

Eén aanpak is bijvoorbeeld om de rekenkracht te concentreren op die plekken waar de krachten het grootst zijn. Een andere is om iets dat optreedt in een tussenliggende schaal zo op te nemen in het model voor de grootste schaal dat het mogelijk is de rekenkracht flink te beperken.

De ontwikkeling van multischaalmodellen is de laatste jaren al flink gevorderd. Nieuw is bijvoorbeeld dat wetenschappers proberen ook toevalsprocessen mee te nemen in hun modellen, en de wisselwerking tussen een materiaal en zijn omgeving.

Multischaalmodellen helpen antwoord te geven op grote wetenschappelijke vragen. De opties om op termijn deze kennis toe te passen in uiteenlopende gebieden als biomaterialen, energie en milieu en veiligheid, zijn legio.

