

Micromecánica de defectos en sólidos

A menudo la conexión entre los defectos en sí mismos y el comportamiento macroscópico observado es muy difícil de forjar teórica o computacionalmente, y sigue siendo un área activa de investigación. Muchos de los mecanismos fundamentales que subyacen en el comportamiento inelástico de materiales están controlados por los defectos en la red cristalina y, por tanto, accesible a simulaciones atomísticas directas, ya sea por medio de potenciales empíricos o a través de cálculos *ab initio* de mecánica cuántica. Sin embargo, los mecanismos a escala atómica están en general separados del comportamiento macroscópico por una amplia gama de escalas continuas. Estas escalas mesoscópicas tanto promedian como establecen las condiciones de contorno o fuerzas impulsoras de los fenómenos a escala atómica y son una parte esencial de la estructura de los materiales.

Aunque eficaz en la descripción del comportamiento macroscópico del material, las teorías del continuo tienden a fracasar en la escala de la red, i.e., en las proximidades de defectos en la red. Por lo tanto, una comprensión completa de comportamiento del material, así como el cálculo predictivo de las propiedades del material, requiere modelización tanto atomística como continua, alcanzándose más eficazmente la relación atomística/continuo dentro del marco de la modelización multiescala.