

Modelaje computacional de biomateriales

Computer modeling of biomaterials

E R Cruz Chu¹

¹Instituto Heidelberg de Estudios Teoricos

E-mail: Eduardo.CruzChu@h-its.org

Resumen. La mejora de las propiedades mecánicas de los materiales depende de la caracterización y manipulación de la microestructura. Los recientes avances en nanotecnología deberían permitirnos fabricar materiales de gran robustez mecánica, ya que los componentes pueden ser ajustados a escala nanométrica. Sin embargo, las reglas usadas para predecir las propiedades mecánicas a nivel de macro y micro escala no son siempre aplicables para las dimensiones de unos cuantos nanómetros. Las fluctuaciones térmicas y los detalles atómicos juegan un rol importante en la escala nanométrica. Felizmente, la naturaleza nos ofrece varios ejemplos de materiales ensamblados con nano componentes: conchas, dientes, huesos y telas de araña combinan fases cristalinas y amorfas de dimensiones nanométricas para producir materiales de gran robustez mecánica, superando a cualquier material sintético.

En esta charla se presenta el método de Simulaciones de Dinámica Molecular como una herramienta básica para el estudio de las propiedades mecánicas de biomateriales, a través de dos ejemplos. El primer caso presenta la tela de araña. Las telas de araña están compuestas de cinco diferentes fibras; la más fuerte es conocida como dragline, y forma las líneas radiales de la tela de araña. Presentaremos la estructura atómica del dragline de la araña *Nephila Clavipes* modelada con simulaciones de dinámica molecular. El sistema está compuesto de medio millón de átomos, combina fases cristalinas y amorfas, y utiliza la exacta secuencia proteica. El segundo caso presenta la concha de nácar. El nácar es un biocompuesto gran dureza y resistencia a la fractura, localizado en la parte interna de las conchas de mar. Una peculiaridad controversial del nácar es la presencia de agujeros de unos cuantos nanómetros de diámetro, también llamados nanoflaws, ya que estos agujeros deberían actuar como puntos de iniciación de fractura, debilitando el material. En este trabajo presentamos la distribución de fuerzas dentro del nácar. Nos enfocamos en como los nanoflaws afectan la ruptura del material, y comparamos los resultados con aproximaciones macroscópicas. Los dos casos mencionados muestran el poder predictivo de la Simulaciones de Dinámica Molecular, tanto para confirmar resultados experimentales, como para proponer nuevas alternativas teóricas y experimentales.

Abstract. Improving the mechanical properties of materials relies on the characterization and control of their microstructure. Recent advances in nanotechnology should allow us to tune materials even further, as the components can be adjusted up to nanoscale level. However, the common rules used to predict mechanical properties at the microscale do not fully apply within the dimensions of nanometers. Thermal fluctuations and atomic details play an important role at the nanoscale. Fortunately, nature offers us several examples of materials build from nanoscale components: Shells, tooth, bones, and spider webs combine crystalline and amorphous phases, resulting in mechanically robust materials, surpassing their synthetic counterparts.

In this talk, I will present the method of Molecular Dynamics Simulations as a basic tool to study mechanical properties of biomaterials through two case studies. The first case presents spider web. Such webs are composed of about five different fibers; the strongest is known as dragline, forming the radial lines in the web. I will introduce the atomic structure of dragline fiber from *Nephila Clavipes*, which was build using Molecular Dynamics Simulations. The system is composed of about half million atoms, integrates amorphous and crystalline phases, and contains the precise aminoacid sequence. The second case presents the nacre shell. Nacre is a biocomposite of great toughness and resistance to fracture located at the inner part of sea shells. A controversial feature is the presence of flaws few nanometers wide, so called nanoflaws. It has been thought that such flaws should act as fracture points, weakening the material. I will present the Force Distribution Analysis within Nacre, focusing on how nanoflaws affect rupture, and comparing the simulation results with macroscopic predictions. Both cases show the predictive power of Molecular Dynamics Simulations to confirm experimental results as well as to propose novel theoretical/experimental tests.