

MATERIALES avanzados

Instituto de Investigaciones en Materiales ■ UNAM

Año 1 ■ Núm. 6 ■ Febrero 2006

ISSN 1665-7071



Espiando en los poros de los materiales: RMN de xenón en fases adsorbidas ■ La ciencia y la tecnología de los materiales: una visión prospectiva para México ■ Aleaciones magnéticas con memoria de forma ■ Los polímeros π -conjugados: veinte años de investigación y avances en optoelectrónica ■ Supercómputo para la ciencia de los materiales: los clusters Beowulf ■ Semblanza del doctor Roberto Escudero ■

PONA, S.A. DE C.V.

Equipo para Laboratorio
Soporte Técnico
Asesoría en Aplicación



MATRIZ
TREVIÑO 1233 PTE. CENTRO
C.P. 64000 MONTERREY, N.L.
TEL: (81) 83-74-18-50 FAX: (81) 83-75-62-66
E-MAIL pona@infosel.net.mx

SUCURSAL MÉXICO
INSURGENTES CENTRO 132-303
C.P. 06470 MÉXICO, D.F.
TEL: (55) 55-66-48-50 FAX: (55) 55-66-44-66
E-MAIL ponamex@infosel.net.mx

SUCURSAL GUADALAJARA
VIOLETA 226 INT. 8 COL. SAN CARLOS
C.P. 44421 GUADALAJARA, JAL.
TEL/FAX: (33) 36-50-04-50
E-MAIL ponagdl@prodigy.net.mx



Programa de
Maestría y Doctorado en

Ciencias QUÍMICAS

Entidades participantes:

- Facultad de Estudios Superiores-Cuautitlán
- Facultad de Química
- Instituto de Ciencias Nucleares
- Instituto de Investigaciones en Materiales
- Instituto de Química

Más de 130 tutores que realizan investigación en todas las áreas de la Química.
Becas de CONACYT para alumnos con promedio mínimo de 8.
Doctorado evaluado por el CONACYT como competente a Nivel Internacional.

Registro al examen de admisión
en septiembre y mayo



Información detallada en:

<http://cienciasquímicas.posgrado.unam.mx>



Universidad Nacional Autónoma de México
Convoca a los aspirantes a ingresar al Programa de Estudios
de Posgrado en Ciencia e Ingeniería de Materiales,
Doctorado y Maestría
Semestre Escolar 2006-2
(del 4 de agosto al 1 de diciembre, 2006)
El Posgrado cuenta con áreas de conocimiento en materiales:
cerámicos, complejos, electrónicos, metálicos y poliméricos

Sedes:

- Ciudad Universitaria, ubicada en la Ciudad de México, Distrito Federal pceim@www.posgrado.unam.mx
- Centro de Ciencias de la Materia Condensada, ubicado en la Ciudad de Ensenada, Estado de Baja California heiras@ccmc.unam.mx
- Centro de Física Aplicada y Tecnología Avanzada, ubicado en Campus UNAM de Juriquilla, Qro. castano@fata.unam.mx
- Centro de Investigación en Energía, ubicado en la Ciudad de Temixco, Estado de Morelos. wrgf@cie.unam.mx

CALENDARIO

Prerregistro de aspirantes: **de la fecha de publicación al 31 de marzo, 2006**
Registro definitivo de aspirantes: **del 3 al 7 de abril, 2006**
Reunión Informativa para aspirantes: **7 de abril a las 10:00 a.m.**
Exámenes de diagnóstico: **17 y 18 de abril, 2006**
Entrevista con el Subcomité de Admisión y Becas: **del 2 al 8 de mayo, 2006**
Publicación del resultado final del proceso de admisión: **31 de mayo, 2006**
Inicio del semestre: **14 de agosto, 2006**
Fin de curso: **1 de diciembre, 2006**

REGISTRO DE ASPIRANTES:

Instituto de Investigaciones en Materiales, UNAM,
Ciudad Universitaria, Apdo. Postal 70-360, Coyoacán, 04510,
México, D. F.
Tel: 56224731, Fax: 56224730

XVIII CONGRESO ADIAT 2006



TECNOLOGÍA SIN FRONTERAS
Acelerando la innovación

TIJUANA, B.C. HOTEL CAMINO REAL
19-21 DE ABRIL

UNA EXPERIENCIA DE ÉXITO

INFORMES E INSCRIPCIONES:

Tels: 0155 5616 7960 / 62 / 64 ext. 212 •
e mail: jmondragon@adiat.org • www.adiat.org



SPECTRAMEX, S.A. DE C.V.

CTO. CIRCUNVALACIÓN PONIENTE NO. 1-302,
CD. SATÉLITE, EDO. DE MÉXICO, CP. 53100, MÉXICO.

E-MAIL 1: gpicco@compuserve.com

TEL: +52 (55) 55629289

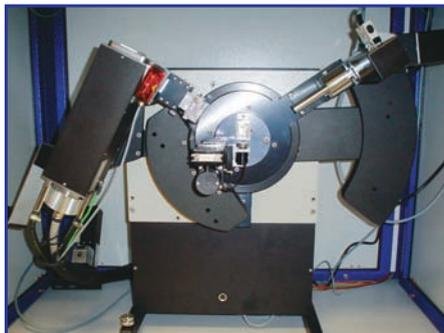
E-MAIL 2: spectramex@aol.com

FAX: +52 (55) 53930318



VENTA Y SERVICIO DE EQUIPOS ANALÍTICOS DE RAYOS X

JEOL, GBC, OXFORD DIFFRACTION, ANTON PAAR, HERZOG, CLAISSE, EDMUND BÜHLER, KATANAX



DIFRACTÓMETROS DE RAYOS X PARA SÓLIDOS, POLVOS, LÍQUIDOS, TERMODIFRACCIÓN

DIFRACTÓMETROS DE RAYOS X MULTIPROPÓSITOS

DIFRACTÓMETROS DE RAYOS X PARA MONOCRISTALES OXFORD DIFFRACTION

DIFRACTÓMETROS DE RAYOS X PARA BAJO Y GRANDES ÁNGULOS

DETECTORES SENSIBLES A LA POSICIÓN

ESPECTRÓMETROS DE FLUORESCENCIA DE RAYOS X, MARCA JEOL

EQUIPOS DE PREPARACIÓN DE MUESTRAS (PRENSAS, MOLINOS Y EQUIPOS DE FUSIÓN)

Presentación

MATERIALES avanZados es una revista de divulgación especializada cuya finalidad es dar a conocer el trabajo de investigación que realizamos los que nos dedicamos a la ciencia y la ingeniería de materiales.

Con este sexto número la revista cumple tres años. Para nuestro tercer aniversario compiten por la atención de los lectores los poros con los polímeros y las aleaciones. Los poros son objeto de espionaje; para las aleaciones se hacen juegos de memoria, mientras que los polímeros que aparecen tienen propiedades optoelectrónicas. Además de estos artículos, presentamos otro que contiene una visión clara acerca de la ciencia y la ingeniería de los materiales en México: el autor presenta la situación en la que nos encontramos con respecto a esta disciplina. Por último encontrarán un artículo en el que se describen las computadoras que pueden utilizarse en este tipo de investigaciones.

Tenemos además el placer de compartir con nuestro amigo y colaborador Roberto Escudero la alegría de obtener el Premio Universidad Nacional. Aprovechamos para enviarle una cariñosa felicitación y en su honor publicamos una reseña sobre su importante labor.

MATERIALES avanZados incluye artículos que se enfocan a la creación de nuevas sustancias y otros que descubren y explican novedosas aplicaciones. Con esto exponemos una panorámica del tema variada y muy interesante. Sin más preámbulo, y reiterando la invitación a contribuir activamente en este foro, que ha cumplido con ser un puente entre los investigadores y el público lector, esperamos que disfruten de este nuevo número.

Instrucciones para los autores

MATERIALES avanZados es una revista de divulgación científica, cuyo propósito es mostrar y discutir los descubrimientos en el área de la investigación en materiales. Los artículos y las secciones recurrirán al lenguaje científico especializado, necesario para mantener el rigor del tema. El principal objetivo de la revista es el de difundir información sobre materiales entre lectores habituados a los temas de investigación.

La revista se publica en español, cada seis meses.

Elaboración de los textos

Se consideran dos tipos de secciones:

a) Artículos cortos, de un máximo de 8,000 caracteres (contando espacios), que ocuparán cuatro páginas de la revista.

b) Artículos largos, con un máximo de 20,000 caracteres (contando espacios) que aparecerán en 10 páginas de la revista.

Siendo ésta una revista de divulgación científica, se recomienda que las fórmulas matemáticas o nomenclatura demasiado especializada se reduzcan al mínimo.

El texto del manuscrito en cuestión tendrá un título y el nombre de los autores con su filiación y dirección electrónica. Podrá contener, además, un resumen, una introducción, los subtítulos necesarios de acuerdo con el tema, las conclusiones y el número necesario de referencias bibliográficas.

Entrega del texto

El texto se entregará en un archivo electrónico vía e-mail, en formato word sin sangrías ni tabuladores.

En el texto se especificará el lugar donde deberán incluirse las figuras.

La lista de los pies de figura se hará al final del texto.

Las figuras se incluirán en un archivo separado en formato word para PC.

Los textos se mandarán a la siguiente dirección electrónica:

martina@chip.iimatercu.unam.mx

El autor responsable de recibir la correspondencia se indicará con un asterisco.

Las referencias se incluirán siguiendo el siguiente formato:

Para revistas

- Inicial del nombre y apellido de los autores, "Título del artículo", *Nombre de la revista*, **VOLUMEN** (año), página inicial y final.

Para libros

- Inicial del nombre y apellido de los autores, *Título del libro*, editorial, país o ciudad, año.

Ilustraciones

Las fotografías e ilustraciones deberán incluirse en uno de los dos formatos siguientes:

- a) Originales en papel fotográfico.
- b) Digitales, con resolución de 300 dpi y en archivos eps o tiff.

Información adicional:

Ana Martínez Vázquez
Editora responsable de
MATERIALES avanZados
Instituto de Investigaciones en
Materiales, Ciudad Universitaria,
UNAM.
04510, México, D.F. México.
Tel. +52 (55) 5622 4596
martina@chip.iimatercu.unam.mx



Nuestra portada: *El teniente de vacíos*.
Alfredo Castañeda, 2005. Óleo sobre tela
(40 x 40 cm).



Universidad Nacional Autónoma de México

Juan Ramón de la Fuente
RECTOR

Enrique del Val Blanco
SECRETARIO GENERAL

René Drucker Colín
COORDINADOR DE LA INVESTIGACIÓN CIENTÍFICA



Instituto de Investigaciones en Materiales

Luis Enrique Sansores Cuevas
Director del Instituto de Investigaciones en Materiales

Ana Martínez Vázquez
Editora Responsable

Comité Editorial
Larissa Alexandrova
Pedro Bosch Giral
Roberto Escudero Derat
Doroteo Mendoza López

Producción
Distribuciones Litoral, S.A. de C.V.
Edición: Pilar Tapia
Diseño: Jeanette Vázquez

Materiales Avanzados es una publicación semestral de 1,500 ejemplares editada por el Instituto de Investigaciones en Materiales de la Universidad Nacional Autónoma de México. Circula de manera controlada y gratuita, mediante suscripciones autorizadas por el Comité Editorial, entre la comunidad científica nacional e internacional.

Los editores autorizan la reproducción de los artículos que se publican en *Materiales Avanzados* siempre y cuando se cite la fuente.

ISSN 1665-7071
Certificado de reserva de derechos al uso exclusivo del título Núm. 04-2003-041612533600-102. Certificado de Licitud de Título 12619 y Certificado de Licitud de Contenido 10191. Impresa en Litho Offset Andina, S.A. de C.V. Laguna de Términos 11, Col. Anáhuac, 11320 México, D.F. Impresa en febrero de 2006.

Agradecemos a la Galería de Arte Mexicano y a los artistas plásticos cuyas obras se reproducen en estas páginas su valiosa colaboración. Damos las gracias también a Patricia Llopis por las fotos de su obra

Impreso en México

MATERIALES avanzados

Contenido

| | |
|--------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| Presentación | 1 |
| Instrucciones para los autores | 2 |
| Noticias | 4 |
| Espiando en los poros de los materiales: RMN de xenón en fases adsorbidas | 7 |
| Enrique Lima | |
| La ciencia y la tecnología de los materiales: una visión prospectiva para México | 13 |
| David Ríos Jara | |
| Aleaciones magnéticas con memoria de forma | 21 |
| David Ríos Jara | |
| Los polímeros π -conjugados: veinte años de investigación y avances en optoelectrónica | 29 |
| Ernesto Rivera, Raúl F. Flores y Gerardo Terán | |
| Supercómputo para la ciencia de los materiales: los clusters Beowulf | 37 |
| César Carlos Díaz Torrejón | |
| Roberto Escudero, Premio UNAM | 47 |
| Pedro Bosch, Larissa Alexandrova y Ana Martínez | |

NOTICIAS

Nuevos estados de la materia

Los estados cuánticos de la materia que se han estudiado a lo largo de la historia son superconductividad en metales (1911), superfluidez en 4He (1937), superfluidez en 3He (1972), superconductividad de alta temperatura crítica en cerámicas (1986) y condensación de Bose–Einstein de átomos ultraenfriados confinados en trampas ópticas (1995). También existe alguna evidencia experimental de la existencia del denominado estado de “súper sólido” cristalino en 4He . Recientemente se ha especulado teóricamente sobre la existencia de dos nuevos estados de la materia: el superfluido metálico y el superfluido superconductor. El candidato para presentar estos nuevos estados es el hidrógeno sometido a presiones extremas y a muy bajas temperaturas. En el caso del estado superfluido superconductor, el sistema consistiría en la existencia de dos tipos de pares de Cooper: electrónicos y protonicos. Se cree que debido a los recientes avances en la síntesis de diamantes ultraduros y con el empleo de celdas de diamante, la condición de presiones extremas para poder observar los nuevos estados de la materia será posible en un futuro cercano.

Phys. Rev. Lett. **95** (2005) 105301 y *Phys. Rev. Lett.* **95** (2005) 135301.

Tiristor orgánico

Un tiristor es un dispositivo electrónico que presenta dos estados de conducción eléctrica que pueden intercambiarse con una señal eléctrica externa. Los tiristores que se emplean actualmente consisten en arreglos de diodos y sus propiedades no lineales provienen de las uniones de tipo n–p de los diodos. Uno de los usos principales de estos dispositivos consiste en la conversión de corriente directa en corriente alterna. Ahora se ha sintetiza-

do un compuesto orgánico conductor, $(\text{BEDT-TTF})_2\text{CsCo}(\text{SCN})_4$, que consiste de capas alternadas conductoras (BEDT-TTF) y capas aislantes ($\text{CsCo}(\text{SCN})_4$) que presenta características eléctricas no lineales. Conectando en serie un cristal del mencionado material orgánico con una resistencia ordinaria, los autores del descubrimiento han logrado convertir señales eléctricas constantes en señales alternas; es decir, el compuesto orgánico en sí mismo se comporta como un tiristor.

Nature **437** (2005) 522.



El oro promueve la oxidación verde

Los procesos industriales de oxidación que convierten los hidrocarburos en aldehídos, cetonas y otros compuestos orgánicos oxigenados podrían convertirse en verdes con el descubrimiento de nanocristales de oro capaces de realizar la catálisis en condiciones amigables. El grupo dirigido por Graham J. Hutchings demostró que nanopartículas de oro soportadas en carbón activado pueden utilizar el oxígeno molecular del aire para convertir alquenos en productos parcialmente oxidados. La catálisis tiene una alta selectividad, que varía cuando

se cambia el disolvente e incluso puede llevarse a cabo en ausencia de disolvente. La industria química puede transformarse si la oxidación selectiva de los hidrocarburos se realiza de manera eficiente y limpia utilizando el oxígeno molecular. Los investigadores tratan ahora de incrementar el rendimiento fabricando un reactor que sea comercialmente viable.

Nature **437** (2005) 1132.

El ADN se retuerce

Los científicos saben desde hace tiempo que el ADN, que normalmente es de conformación “de mano derecha”, es una molécula que puede girar sobre sí misma y convertirse en una molécula “de mano izquierda”. Con los nuevos estudios de difracción de rayos X se analiza la forma en que se produce este cambio conformacional y se estudian las razones por las que se presenta este fenómeno. Los resultados muestran que al cambiar de conformación, sólo se rompe la unión entre un par de bases y con eso se provoca que gire toda la molécula. Parece que esto minimiza el impacto de posibles alteraciones en la molécula de ADN. Algunos estudios recientes sugieren que este cambio desempeña un papel en la patogénesis de los virus y en la expresión genética.

Nature **437** (2005) 1183.



Estadística de partículas en la naturaleza

La descripción cuántica del comportamiento de las partículas en la natu-

raleza se basa en dos estadísticas cuánticas: la distribución de Bose–Einstein, que describe los llamados bosones, y la de Fermi–Dirac, en la que las partículas toman el nombre de fermiones. A los sistemas formados por bosones, como por ejemplo los fotones y los fonones, les gusta permanecer en los mismos estados cuánticos. De ahí que con ellos se puedan construir láseres, cosa que resultaría imposible con fermiones. En cambio los fermiones, como los electrones, son bastante singulares, ya que sólo dos de ellos pueden ocupar un nivel energético. De ahí el comportamiento tan especial de los metales, en los que las temperaturas de Fermi son gigantescas. Las predicciones teóricas siempre han mencionado la posibilidad de otras estadísticas, necesariamente fraccionarias, para explicar el comportamiento de la naturaleza en algunas situaciones físicas; éstas se llaman estadísticas de aniones, cuyo nombre proviene de la palabra inglesa *any*. Pues bien, en el número de la revista *Physical Review Letters* del 21 octubre de 2005 se publica un artículo experimental en el que sus autores mencionan el hecho de haber encontrado evidencias de estadística fraccionaria en el comportamiento de partículas en experimentos de efecto cuántico fraccionario.

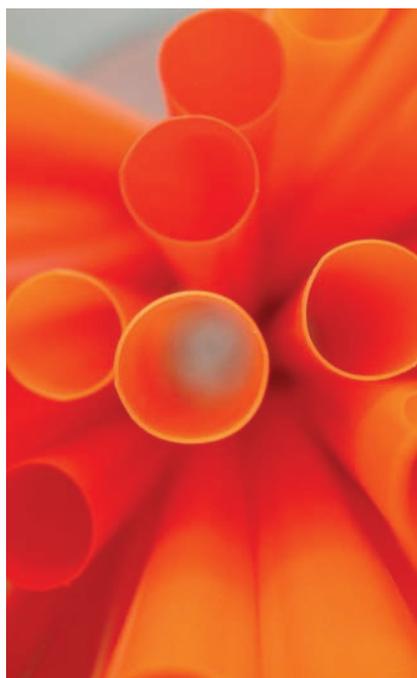
E.A. Kim et al., *Phys. Rev. Lett.* **95** (2005) 176402.

Nanotubos de carbono de una capa

Investigadores de Los Alamos National Laboratory, en Nuevo México, han logrado sintetizar nanotubos de carbono de una capa (SWNT) hasta de 4 cm de longitud. La forma de lograr la síntesis consiste en la descomposición de etanol usando hierro como catalizador del proceso. Para lograr esta síntesis, una solución de etanol y FeCl_3 en las proporciones adecuadas se aplica en un sustrato de silicio a una temperatura de 900 °C, durante un lapso corto del orden de 30 minutos. La reacción se lleva a cabo manteniendo un flujo de Ar-H_2 . Poste-

riormente se introducen vapores de etanol y al cabo de una hora los investigadores lograron obtener SWNT de 4 cm de longitud. Además se ha descubierto que el óxido de silicio en el sustrato de silicio promueve el crecimiento de los nanotubos. Estos resultados tienen grandes implicaciones tecnológicas, ya que usar estas características de crecimiento en formas similares, pero en diferente escala, permitiría la posibilidad de sintetizar SWNT de una forma continua sin limitaciones de longitud. El uso de etanol en particular se ha preferido debido a que no tiende a formar residuos de carbón amorfo.

L.X. Zheng et al., *Nature* (2004) 673.



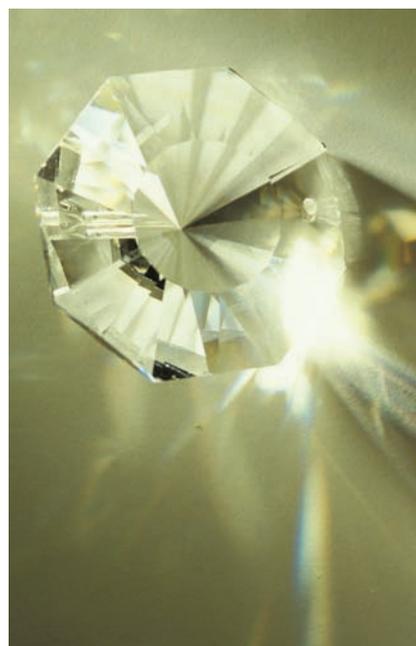
Aislamiento de una capa de grafeno

Dos de las formas más conocidas del carbono son el diamante y el grafito. El grafito es un semimetal, mientras el diamante es un aislante. Últimamente se han encontrado nuevas propiedades físicas en estas dos formas alotrópicas; por ejemplo, si se añaden impurezas al diamante bajo ciertas circunstancias, se puede tornar en un material superconductor. El grafito, por su parte, es un

material que ha dado origen a los famosos nanotubos de carbono y a los fullerenos. El grafito está formado por múltiples capas de grafeno, que es la celda elemental; el grafeno, a su vez, es una monocapa de átomos de carbono empaquetados en una densa estructura cristalina tipo “panal de abeja”. El grafito, por lo tanto, se forma cuando muchas capas de grafeno se juntan, una encima de otra; las capas se mantienen unidas debido a fuerzas de van der Waals; sin embargo, hasta ahora ha sido imposible experimentalmente lograr aislar una sola capa de grafeno.

Dos artículos publicados en el primer número de noviembre de 2005 en la prestigiosa revista *Nature* revelan el aislamiento de una sola capa de grafeno y, en contra de lo que teóricamente se predecía, ésta es enteramente estable. En particular se han encontrado propiedades muy especiales: las cargas libres en el grafeno se comportan de una forma similar a las partículas relativistas, con cero masa en reposo y con una velocidad efectiva igual a la “velocidad de la luz” de 106 m/seg; además, se ha observado efecto Hall cuántico y el comportamiento de una fase de Berry.

K.S. Novoselov et al., *Nature*, **438** (2005) 197. Y. Zhang et al., *Nature*, **438** (2005) 201.



Arte y física

Por Pedro Bosch

Leonard Shlain, *Art and Physics. Parallel Visions in Space, Time & Light*

Títulos como *Ciencia y religión*, *Literatura y ciencia* o *Civismo y ciencia*, en general, son repelentes. Un libro como *Arte y física*, escrito por un cirujano, el señor Leonard Shlain, no escapa a la regla. El arte y la física son, *a priori*, disciplinas totalmente ajenas y desvinculadas tanto por el método de estudio como por el objetivo. Se acepta que el arte crea ilusiones para conmovir mientras que la física pretende ser una ciencia; es más, una ciencia exacta. Poco tiene que ver lo uno con lo otro.

El planteamiento de Shlain es, justamente, que no, y a esta discusión le dedica 480 páginas. Y aquí viene a cuento recordar a Zola cuando definía el arte como “la naturaleza vista a través de un temperamento”. ¿Y qué es la física sino el estudio de la naturaleza? El arte que se discute en este libro no es el académico ni el convencional, es el más revolucionario de cada época, el que ha cambiado el modo de contemplar el mundo. Y aquí hay que referirse a Gauguin, quien aseguraba que sólo había dos tipos de artistas: los revolucionarios y los plagiarios. Quizá ésta sea una aseveración válida también en ciencia y en ese sentido no cabe duda de que el arte y la ciencia se rigen por principios creativos comparables. El autor expone en paralelo los hallazgos artísticos más novedosos y los descubrimientos que en la física han llevado a una revisión del concepto de la realidad.

Estos momentos de cambio se asocian en general con una personalidad. Así, Giotto y Galileo van de la mano; da Vinci y Newton, Picasso y Einstein, Matisse y Heisenberg son algunas de las parejas que Shlain nos propone. A partir de esta vinculación entre las revoluciones artísticas y las físicas, el libro trata de demostrar que el arte ha intuido los descubrimientos de la física. La propuesta es tentadora y merece discutirse. Por ejemplo, se asegura que los esquemas del batir de las alas de un pájaro, hechos por Leonardo da Vinci, se anticiparon a las fotografías secuenciales a intervalos fijos de tiempo, o que los relojes ablandados de Dalí anunciaron la teoría de la relatividad de Einstein. Shlain afirma, por ejemplo: “setenta años antes de la explicación formal de la relatividad, el artista japonés Hokusai se anticipó a las múltiples vistas del *Mont Sainte Victoire* por Cézanne al pintar el Monte Fuji desde treinta y seis puntos de vista. Al retratar el *Monte Fuji* desde diferentes lugares en el espacio y diferentes momentos en el tiempo, Hokusai [...] sugirió la naturaleza recíproca del espacio y del tiempo”. Es decir, según Shlain, el arte ha sabido ilustrar conceptos que después la física ha traducido en palabras y ecuaciones, y para explicarlo, en el último capítulo, se apoya en la estructura cerebral y en las teorías de Jung. Utiliza la mitología griega para entender por qué el arte y la física están separados en nuestras mentes, subyacente se encuentra la idea de que el arte y la física son expresiones de diferentes lados del cerebro, idea un tanto simplistica pero fructífera.

En la última página Shlain recomienda que “cada uno de nosotros se transforme en Jano. Él [se refiere al dios romano] ocupa un umbral y mira tanto hacia adelante como hacia atrás en un mismo instante contemplando simultáneamente lo que ha pasado y lo que pasará. Del centro del pasado al borde del futuro, Jano contempla dos vistas, en el espacio y en el tiempo, simultáneamente. Si imaginamos que una cara es el arte y la otra la física, estas dos perspectivas nos invitan a cambiar la manera de ver y de considerar el mundo. Aparentemente divergentes en su enfoque, el artista y el físico nos entregan revisiones de la realidad”.

Pero... ¿será cierto que los cuadros de Malevich, que pretenden ser pinturas abstractas carentes de imagen, color y luz, son precursores de los hoyos negros? En ocasiones uno se pregunta hasta qué punto los paralelos presentados son más bien fruto de la casualidad y no de una lógica rigurosa. Los capítulos sobre la relatividad son sin duda los menos convincentes.

La organización del libro es relativamente sencilla: los capítulos siguen un orden cronológico y cada uno de ellos pretende desarrollar tanto los descubrimientos de la física como los del arte de ciertos periodos. El nombre de los capítulos es suficientemente explícito. Así, el libro inicia con: capítulo 1: Ilusión / Realidad, capítulo 2: Arte clásico / Filosofía ideal, capítulo 3: Sagrado / Profano, capítulo 4: Perspectiva estacionaria / Reposo absoluto, capítulo 5: Secciones cónicas / Órbitas elípticas. Continúa con: capítulo 24: Masa escultórica / Espacio-tiempo curvo, capítulo 25: Yo / Nosotros, capítulo 26: Izquierdo / Derecho, capítulo 27: Espacio / Tiempo. Y cierra con un par de capítulos dedicados a consideraciones mitológicas y finales: capítulo 28: Dionisos / Apolo, capítulo 29: Arte / Física.

En resumidas cuentas se puede afirmar que el libro es entretenido y se deja leer, está al alcance tanto del físico y del artista como del aficionado a estas disciplinas. Diagramas y algunas reproducciones de cuadros famosos ayudan a entender la tesis del autor, clara y precisa. En fin, es un libro recomendable para quien se interese en temas provocativos y discutibles.



Mujer ante el espejo. Pablo Picasso, 1932. Óleo (62 x 132 cm). Detalle.

Espiando en los poros de los materiales: RMN de xenón en fases adsorbidas

Enrique Lima, Instituto de Investigaciones en Materiales, UNAM.

Introducción

El interés del hombre por el conocimiento o la conquista del espacio ha desembocado en las misiones *Apolo*, *Galileo* y *Ulises*, entre otras. Sin duda, una de las expediciones espaciales más recordada es el viaje de la sonda *Opportunity* para explorar Marte, que logró enviar fotografías e información que sugieren que en algún tiempo existió agua en el planeta rojo.¹ También se han enviado sondas mecánicas al espacio, para que desempeñen el papel de espía y manden información a los seres humanos aquí en la Tierra. Este espionaje también considera la posibilidad de enviar seres vivos y en 1957 la nave *Sputnik II* llevó a Laika al espacio; sin embargo, la perra soviética sobrevivió sólo una semana después del despegue.²

De la misma manera en que el hombre echa mano de las sondas espaciales para obtener información de lugares en donde nunca ha estado físicamente, la ciencia de los materiales maneja sus propias sondas para alcanzar lugares inaccesibles, como los microporos de los materiales. Para este fin, las sondas no son robots sino moléculas químicas y no se envían al espacio, sino a la superficie de los materiales. Desde luego, no basta enviar la sonda *Messenger* a Mercurio o *Viajero* a Urano³ para conocerlos totalmente; tampoco es suficiente enviar una molécula al interior de los poros de un material. Es necesario analizar la información que las sondas captan, trátase de las espaciales o de las moleculares. En el caso de las sondas espaciales, las señales que envían son magnéticas o eléctricas en la mayoría de los casos;



Para llegar I. Alfredo Castañeda, 2005. Retablo, dos óleos sobre tela (70 x 90 cm).

estas señales se reciben e interpretan aquí, en la Tierra, en laboratorios muy especializados de la NASA o de otros centros de investigación. En el caso de las sondas moleculares, la información que se recaba se obtiene con frecuencia mediante técnicas espectroscópicas.

Volvamos al caso de Laika, que murió a bordo del *Sputnik II*, porque éste también podría ser el destino de algunas moléculas sonda en el interior de los materiales, ya que cuando se adsorben en la superficie de un material reaccionan químicamente y desaparecen para formar otra especie química. Otras no reaccionan, pero algunas de sus propiedades físicas se alteran y estas alteraciones se pueden aprovechar para obtener información del material adsorbente. Existen entonces sondas inertes y reactivas que ayudan en la caracterización de materiales. La elección tanto de la molécula sonda como de la técnica espectroscópica o fisicoquímica para el seguimiento de la molécula sonda depende, evidentemente, de las propiedades que se desean conocer del material adsorbente. El presente artículo menciona algunos aspectos de la adsorción de moléculas sonda reactivas e inertes; además, se describe en detalle la técnica de resonancia magnética nuclear (RMN) de xenón como una aplicación en la caracterización de la porosidad.

La ciencia de los materiales produce sondas para alcanzar lugares inaccesibles, como los poros de los materiales

Elección de la molécula sonda

Una sonda espacial se envía al espacio con un propósito muy específico y se construye especialmente para cumplir una misión. Así, la NASA llevó a cabo el proyecto *Galileo* para diseñar la sonda que envió a Júpiter con objeto de reunir información sobre los gases que conforman su atmósfera.

Tabla 1. Moléculas sonda más utilizadas en la caracterización de materiales

| Molécula sonda | Técnica de caracterización | Principal aplicación | Tipo de adsorción | Referencia bibliográfica |
|-------------------------------------------------|----------------------------|---------------------------------------|-------------------------------------|--------------------------|
| Dióxido de carbono, CO ₂ | TPD calorimetría y FTIR | Sitios básicos | Quimisorción reactiva y no reactiva | 4 |
| Monóxido de carbono, CO | FTIR | Partículas metálicas soportadas | Quimisorción no reactiva | 5 |
| Nitrometano, CH ₃ NO ₂ | FTIR y RMN | Sitios ácidos y básicos | Quimisorción reactiva y no reactiva | 6, 7 |
| Anilina C ₆ H ₇ N | EPR y FTIR | Sitios ácidos | Quimisorción reactiva | 8 |
| Piridina C ₅ H ₅ N | FTIR y RMN | Sitios ácidos | Fisorción y quimisorción reactiva | 9 |
| Trimetilfosfina C ₃ H ₉ P | RMN | Sitios ácidos | Quimisorción reactiva | 10 |
| Xenón, Xe | RMN | Microporosidad | Fisorción no reactiva | 11 |
| Oxígeno, O ₂ | RMN | Accesibilidad de sitios en microporos | Fisorción no reactiva | 12 |

También se creó especialmente la sonda *Cassini-Huygens* para explorar Saturno y visitar cuarenta y cinco veces su luna Titán.³

De la misma manera que para espiar en el universo se necesita la sonda adecuada, también en la caracterización de materiales es importante elegir la molécula sonda en función de la naturaleza del material a caracterizar y de la información que se desee obtener. La técnica que se emplee para seguir la evolución de la molécula sonda

sensibilidad diferente según la superficie del sólido y de la molécula sonda. Las moléculas sonda pueden reaccionar químicamente o permanecer inertes cuando se adsorben en los materiales. En la tabla 1 se citan las moléculas sonda que se utilizan con más frecuencia y se incluye la técnica espectroscópica recomendable en la caracterización.

Molécula sonda reactiva: nitrometano

Algunas moléculas sonda reaccionan químicamente cuando interactúan con los materiales; por eso parecería que estas moléculas no son adecuadas para sondear propiedades de sólidos; sin embargo, se puede sacar ventaja de esta reactividad y conocer, por ejemplo, el tipo de acidez o basicidad en la superficie de un sólido. Tal es el caso de la molécula sonda nitrometano, que cuando se adsorbe en superficies de óxidos origina la formación de diferentes especies. El nitrometano reacciona rápidamente en materiales como la alúmina, los óxidos mixtos y las zeolitas. Las principales especies que se forman son las tautoméricas del nitrometano, el anión metazonato o el formiato.⁶ La cantidad

durante su exploración del adsorbente también tiene un papel importante. Para caracterizar propiedades como la basicidad, la acidez o la porosidad de un material se pueden utilizar técnicas como la calorimetría, la desorción a temperatura programada, la espectroscopia de infrarrojo y la espectroscopia de resonancia magnética nuclear. Cada técnica presenta una

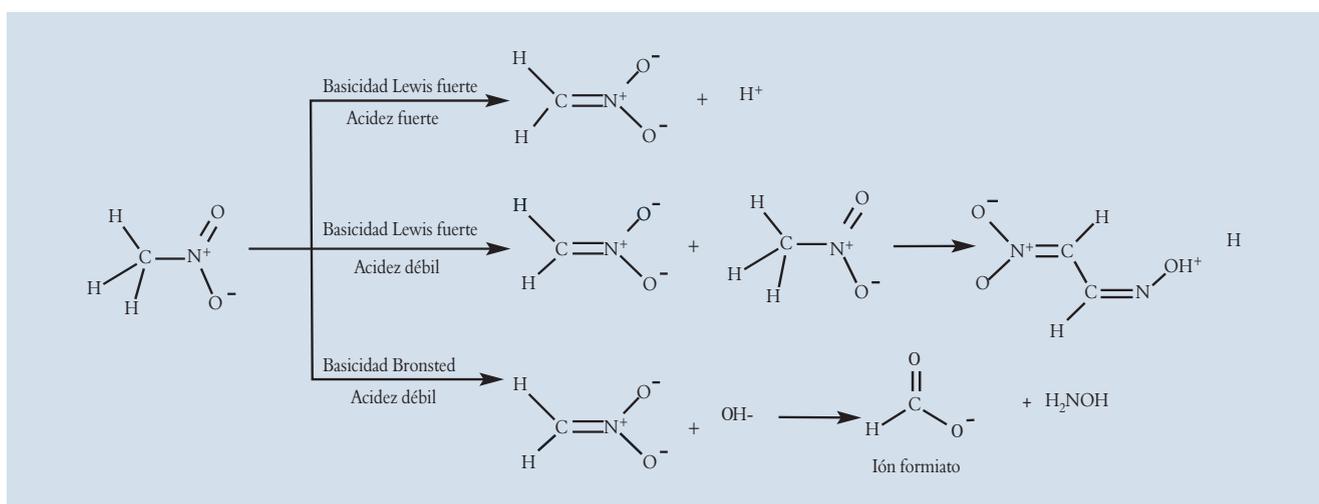


Figura 1. Reactividad del nitrometano en óxidos con diferentes propiedades ácido-básicas.

relativa de estas especies químicas es una función de la basicidad y la acidez de la superficie del óxido. En efecto, estudios de resonancia magnética nuclear con rotación al ángulo mágico y polarización cruzada de ^{13}C (^{13}C CP/MAS RMN) han mostrado que la naturaleza de las especies formadas cuando el nitrometano se adsorbe en una superficie depende mucho del tipo de basicidad que posea dicha superficie⁷ (figura 1).

Además de información cualitativa que relaciona la naturaleza de los sitios básicos y las especies formadas identificadas por ^{13}C CP/MAS RMN, se ha reportado una correlación lineal entre la posición de los desplazamientos químicos observados en RMN para la especie aci-anión nitrometano y la fuerza del sitio de adsorción medida a partir de un estudio de microcalorimetría.⁶ En resumen: el nitrometano seguido por RMN constituye una molécula sonda capaz de identificar el tipo de basicidad y la fuerza de los sitios.

Molécula sonda no reactiva: xenón

El xenón es un gas monoatómico químicamente inerte, el isótopo ^{129}Xe tiene una abundancia natural de 26.4 por ciento y posee un espín nuclear de 1/2. Un átomo de xenón mide 0.43 nm, es esférico y muy polarizable. Este

conjunto de propiedades convierten al xenón en una buena molécula sonda; en efecto, su carácter polarizable y su tamaño lo hacen muy sensible al medio ambiente que lo rodea, entonces la RMN es la técnica adecuada para seguir este tipo de molécula y ya se ha demostrado que el desplaza-

están en interacción constante con las paredes del poro y los otros átomos de xenón. También existe una interacción entre los átomos de xenón y todas las especies químicas presentes en el poro; entonces, la posición de la frecuencia de resonancia depende de estas diferentes interacciones. Para una me-

El xenón ha probado su utilidad en la caracterización de los materiales

miento químico del xenón adsorbido en diferentes materiales porosos puede variar en un intervalo amplio de 7,500 ppm.¹³

Los átomos de xenón adsorbidos en la superficie de un sólido poroso

jor comprensión de las contribuciones individuales al desplazamiento químico observado en el Xe adsorbido en un poro es muy útil la siguiente ecuación, propuesta por Fraissard y sus colaboradores:¹¹

$$\delta_{\text{obs}} = \delta_0 + \delta_s + \delta_{\text{Xe-Xe}} + \delta_{\text{SAS}} + \delta_E + \delta_M$$

donde:

- δ_0 = desplazamiento de referencia e igual a cero por definición.
- δ_s = desplazamiento debido a las colisiones del xenón con las paredes del poro.
- $\delta_{\text{Xe-Xe}}$ = desplazamiento debido a las colisiones entre átomos de xenón.
- δ_{SAS} = desplazamiento debido a interacciones del xenón con sitios de adsorción fuerte.
- δ_E = desplazamiento debido a campos eléctricos.
- δ_M = desplazamiento debido a campos magnéticos.

Para mostrar las ventajas de esta ecuación hay que considerar la figura 2, en la que se representa la gran cavidad de una zeolita X, que aloja en su interior diferentes especies químicas

entonces habrá una contribución importante de δ_{SAS} al desplazamiento químico observado; además, hay que notar que el espacio vacío en la cavidad disminuye cuando se pasa del ca-

para la misma concentración de xenón). El caso *c* tiene cierta semejanza con el *b*, no obstante el reemplazo del cúmulo de oro por el benceno provoca que la densidad electrónica dentro del poro sea diferente, por lo tanto la contribución de δ_{SAS} será diferente. Finalmente, en el caso *d* hay una contribución del término δ_M . En efecto, se sabe que el carácter paramagnético del Co^{2+} afecta las señales RMN. Los desplazamientos químicos observados en los cuatro casos que se acaban de representar serán diferentes, es decir, el Xe dentro de los microporos es capaz de sondear la presencia de moléculas orgánicas, especies paramagnéticas o agregados metálicos.^{14,15}

La RMN ^{129}Xe en fases adsorbidas se ha aplicado en la caracterización no sólo de materiales zeolíticos sino de muchos otros, como los hidratos, los caltratos, los mesoporosos o los polímeros. En el caso de los polímeros amorfos, la técnica ha resultado ser particularmente eficiente cuando los espectros se obtienen a diferentes temperaturas. En efecto, la movilidad de las cadenas poliméricas depende en gran medida de la temperatura, la señal RMN se ve muy afectada y por lo tanto se puede emplear, por ejemplo, para calcular la temperatura de transición de vidrio (Tg), figura 3. Antes de la Tg, el xenón está generalmente inmovilizado en la matriz polimérica y las señales RMN son anchas. A temperaturas más elevadas que Tg, la movilidad de las cadenas permite la difusión del xenón hacia diferentes

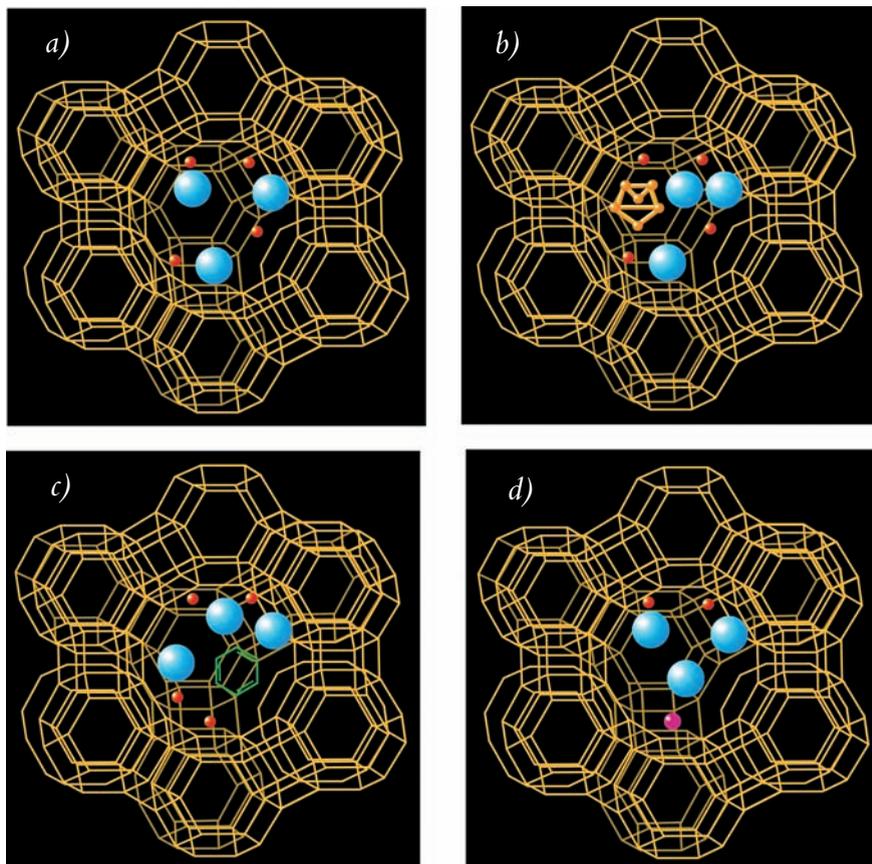


Figura 2. Representación de la adsorción de xenón en la gran cavidad de la zeolita X.

para los siguientes cuatro casos: *a*) cuatro cationes de compensación Na^+ ; *b*) cuatro cationes de compensación Na^+ y un cúmulo de oro neutro; *c*) cuatro cationes de compensación Na^+ y una molécula de benceno, y *d*) dos cationes de compensación Na^+ y un catión de compensación Co^{2+} .

Para la misma concentración de Xe, los desplazamientos químicos observados en los cuatro casos son muy diferentes. Es evidente que en el primero sólo contribuyen las interacciones xenón-xenón y xenón-paredes del poro. En el segundo caso, dentro de la cavidad zeolítica además de los cationes Na^+ existen cúmulos de oro,

so *a* al *b* y, como consecuencia, las colisiones Xe-Xe no ocurren con la misma frecuencia en los dos casos (aun

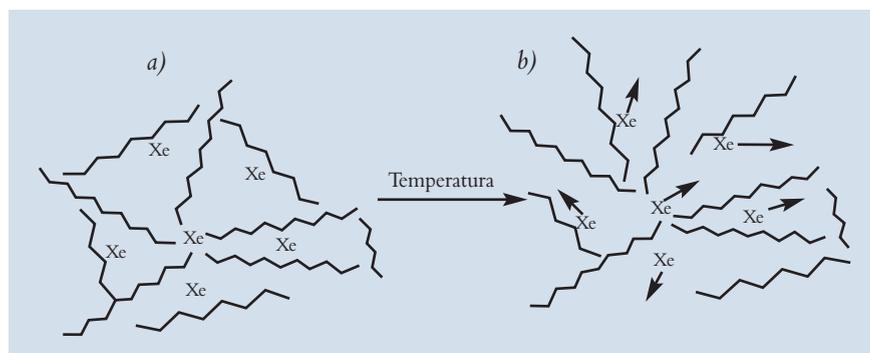


Figura 3. Xenón adsorbido en polímeros amorfos; *a*) antes y *b*) después de la temperatura de transición vítrea.

sitios de la matriz y los picos RMN observados son estrechos.¹⁶

Dos moléculas sonda forman equipo

Como se acaba de mostrar, el ^{129}Xe es una buena molécula sonda, pero: ¿el

mero de espín nuclear, \hbar es la constante de Planck y eQ es la componente mayor del tensor de gradiente de campo eléctrico.

El término eQ es desconocido y no puede suponerse un valor, ya que este gradiente de campo eléctrico es par-

cámaras fotográficas y generadores de energía, entre otros aparatos. Por ejemplo, *Cassini-Huygens* se equipó con los instrumentos más refinados para detectar campos magnéticos, cargas eléctricas y densidades de partículas atómicas. Aquí cabe hacerse la pregunta: ¿cómo se equiparía al ^{129}Xe para poder utilizarlo como molécula sonda? El xenón sólo necesita estar puro para utilizarse como espía en materiales microporosos, pero pueden considerarse los sistemas porosos de la figura 4.

Para una misma carga de xenón, las interacciones xenón-pared del poro serán más frecuentes en el caso de los materiales microporosos (caso *a*) que en el caso de los materiales mesoporosos (caso *b*), por lo que la técnica se ve limitada en estos casos. Afortunadamente el xenón puede “acondicionarse” para ser más sensible. Algunos estudios muestran que cuando el xenón se hiperpolariza antes de enviarse al mesoporo su sensibilidad aumenta considerablemente.¹⁹ Éste es tan sólo un caso en el cual el xenón hiperpolarizado funciona muy bien, pero existen otros.

No sólo la hiperpolarización puede favorecer la sensibilidad de la técnica, también otros factores pueden influir; por ejemplo, suponer un material en donde el xenón puede adsorberse en dos poros (figura 5). A una temperatura T , el xenón estará intercambiándose entre los sitios A y B y se observará una sola señal RMN. A temperaturas más bajas que T , la velocidad de intercambio de xenón disminuye, es decir que como el tiempo de residencia de los

Tabla 2. Comparación de algunas propiedades de los isótopos 129 y 131 del xenón

| Propiedad | ^{129}Xe | ^{131}Xe |
|---------------------------------------|-------------------|-------------------|
| Reactividad química | inerte | inerte |
| Abundancia isotópica natural | 26.4 % | 21.6 % |
| Espín nuclear | 1/2 | 3/2 |
| Momento cuadrupolar | 0 | -0.12 |
| Frecuencia RMN en un campo de 500 MHz | 138.33 MHz | 41.09 MHz |

^{129}Xe podría hacer equipo con alguna otra molécula sonda? ¿Qué información se obtendría?

La tabla 2 compara algunas de las propiedades del ^{129}Xe con las del ^{131}Xe . Una de las diferencias evidentes es que el ^{131}Xe ($S=3/2$) posee un momento cuadrupolar, a diferencia del ^{129}Xe ($S=1/2$) que no lo tiene. ¿Cómo puede aprovecharse esta diferencia? Bien, el desplazamiento químico del ^{131}Xe puede igualarse al desplazamiento químico del ^{129}Xe más una contribución, δ_{SOQS} , debida a los efectos cuadrupolares. Matemáticamente se puede expresar como:

$$\delta_{^{131}\text{Xe}} = \delta_{^{129}\text{Xe}} + \delta_{\text{SOQS}}$$

Los desplazamientos químicos se pueden obtener experimentalmente y a partir de la ecuación anterior se puede calcular el término δ_{SOQS} . ¿Es útil este término? Es muy útil si se recurre a su definición matemática:

$$\delta_{\text{SOQS}} = -\frac{3}{10} \frac{eQ}{\omega_0^2} \left[\frac{eQ}{2I(I-1)\hbar} \right]^2 \left[\frac{1}{4} (I+1) - \frac{3}{4} \right] \left[1 + \frac{\eta^2}{3} \right]$$

Donde η es un factor de asimetría, eQ es el momento cuadrupolar, ω_0 es la frecuencia de Larmor, I es el nú-

merico para cada sistema. Los términos η , eQ , ω_0 , I , si se conocen o es fácil suponerlos sin mucha discrepancia de su valor real. Entonces, si se conoce δ_{SOQS} a partir de los espectros de xenón, se puede calcular eQ . La combinación de la RMN ^{129}Xe y ^{131}Xe constituye así un método para calcular gradientes de campo eléctrico en sitios muy específicos. Por ejemplo, considérese nuevamente el caso de la gran cavidad de una zeolita X con cationes de compensación Na^+ , (figura 1, caso *a*). Este sitio tiene un gradiente de campo eléctrico debido a la sustitución aleatoria de iones Si^{4+} por Al^{3+} . El gradiente de campo eléctrico calculado¹⁷ por RMN de xenón para este sitio es de $16.3 \times 10^{19} \text{ V}\cdot\text{m}^{-2}$.

Para equipar la sonda

Una nave o sonda espacial siempre se lanza equipada con espectrómetros,

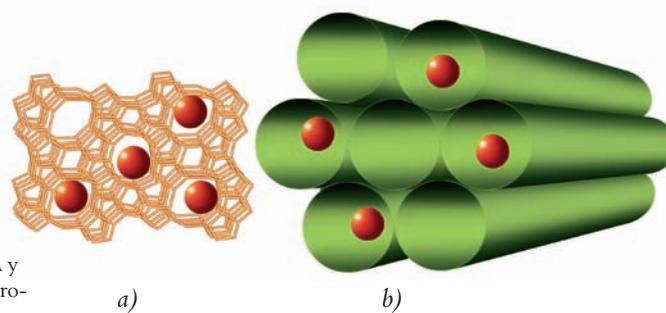


Figura 4. Representación de la adsorción de xenón sobre: *a*) zeolita ZSM5 con poros regulares de 5 Å y *b*) sobre sílice mesoporosa con poros de 40 Å.

átomos de xenón en los sitios A y B es más largo, se observarán dos señales RMN, una por cada sitio.

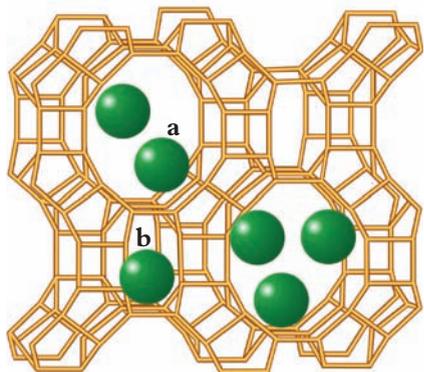


Figura 5. Representación de la adsorción de xenón en un sólido que contiene poros de dos tamaños diferentes (a y b).

Equipo, material y laboratorio

Una vez expuestos los alcances de la técnica de RMN en fases adsorbidas es conveniente mencionar que este tipo de experimentos se lleva a cabo siguiendo las siguientes etapas.

a) Evacuación del material poroso en una rampa de vacío con el fin de tener la mayor cantidad posible de espacios libres vacíos. b) Trazar las isotermas de adsorción de xenón. Carga del xenón (diferentes cantidades) en el material poroso. c) Aislar el material que adsorbió xenón (sellado al vacío y/o utilización de celdas RMN especiales). d) Adquisición de los datos RMN en un espectrómetro. Las secuencias de pulsos a utilizar dependen del material a caracterizar y del isótopo de xenón observable.

Conclusión

Mientras la NASA se prepara para construir automóviles voladores con el fin de que el hombre se desplace en pistas aéreas, la ciencia de los materiales también progresa y cada día son más las moléculas sonda que navegan por el interior de los materiales.

Así como en la exploración del espacio cada misión es diferente, en la caracterización de materiales cada ex-

perimento es original. Si se pretende estudiar la acidez y basicidad de una superficie, la molécula puede ser el nitrometano; en cambio, si se necesita estimar el gradiente de campo eléctrico, la combinación del ^{131}Xe y ^{129}Xe seguido por RMN será lo más adecuado. Esta es una línea de investigación en la que el único límite es la imaginación. Actualmente se puede afirmar que el xenón seguido por RMN constituye una herramienta muy poderosa en la caracterización de materiales porosos y cada día son más las aplicaciones que encuentra esta técnica. ■

Bibliografía

- ¹ B.M. Hynek, "Implications for Hydrologic Processes on Mars from Extensive Bedrock Outcrops throughout *Terra Meridiani*", *Nature*, **431** (2004) 156-159.
- ² "Soviet Fires New Satellite, Carrying Dog", *The New York Times*, 3 de noviembre de 1957.
- ³ <http://www.nasa.gov>
- ⁴ S.E. Siporin, B.C. McClain, R.J. Davis, "Adsorption of N_2 and CO_2 on Zeolite X Exchanged with Potassium, Barium, or Lanthanum", *Langmuir*, **19** (2003) 4707-4713.
- ⁵ K. Wolter, O. Seiferth, J. Libuda, H. Kuhlenbeck, M. Bäumer, H. Freund, "Infrared Study of CO Adsorption on Alumina Supported Palladium Particles", *Surf. Sci.*, **402** (1998) 428-432.
- ⁶ E. Lima, L.C. de Ménorval, D. Tichit, M. Lasperas, F. Fajula, "Characterization of the Acid-base Properties of Oxide Surface by ^{13}C CP/MAS NMR Using Adsorption of Nitromethane", *J. Phys. Chem. B.*, **107** (2003) 4070-4073.
- ⁷ E. Lima, M. Lasperas, L.C. de Ménorval, D. Tichit, F. Fajula, "Characterization of basic Catalysts by the Use of Nitromethane as NMR Probe Molecule and Reactant", *J. Catal.*, **223** (2004) 28-35.
- ⁸ F.R. Chen, J.J. Fripiat, "Formation of Radical Pairs in Aniline Adsorption on Zeolites", *J. Phys. Chem.*, **96** (1992) 819-823.
- ⁹ R. J. Gorte, D. White, "Interactions

of chemical species with acid sites in zeolites", *Topics in catalysis*, **4** (1997) 57-69.

¹⁰ T.C. Sheng, I.D. Gay, "Measurement of Surface Acidity by ^{31}P NMR of Adsorbed Trimethylphosphine", *J. Catal.*, **145** (1994) 10-15.

¹¹ T. Ito, J. Fraissard, " ^{129}Xe NMR Study of Xenon Adsorbed on Y Zeolites", *J. Chem. Phys.*, **76** (1982) 5225-5229.

¹² J. Plévert, L.C. de Ménorval, F. di Renzo, F. Fajula, "Accessibility of Cation Site in Zeolites by ^6Li MAS NMR Spectroscopy Using Paramagnetic O_2 as a Chemical Shift Agent", *J. Phys. Chem. B.*, **102** (1998) 3412-3416.

¹³ C.I. Ratcliffe, "Xenon NMR", *Ann. Rep. NMR Spectr.*, **36** (1998) 123-221.

¹⁴ A.R. Pradhan, T.S. Lin, W.H. Chen, S. J. Jong, J.F. Wu, K.J. Chao, S.B. Liu, "EPR and NMR Studies of Coke Induced Selectivation over HZSM5 Zeolite during Ethylbenzene Disproportionation Reaction", *J. Catal.*, **134** (1999) 29-38.

¹⁵ I. Tuzovskaya, N. Bogdanchikova, A. Pestryakov, E. Lima, A. Simakov, V. Gurin, E. Smolentseva, M. Ávalos, M. Farias, "Study of Dispersed Species in Gold-zeolite Catalysis", XIII Congreso Internacional de Catálisis, París, Francia, 2004.

¹⁶ A.P.M. Kentgens, H.A. Van Boxtel, R.J. Verweel, W.S. Veeman, "Line-broadening Effects for Xenon-129 Absorbed in the Amorphous State of Solid Polymers", *Macromolecules*, **24** (1991) 3712-3714.

¹⁷ Y. Millot, P.P. Man, M.A. Springuél-Huet, J. Fraissard, "Quantification of Electric-field Gradients in the Super-cage of Y Zeolites by Comparing the Chemical Shifts of ^{131}Xe ($I = 3/2$) and ^{129}Xe ($I = 1/2$)", *Stud. Surf. Sci. Catal.*, **135** (2001) 2341-2344.

¹⁸ I.L. Moudrakovski, V.V. Terskikh, C.I. Ratcliffe, J.A. Ripmeester, L.Q. Wang, Y. Shin, G. Exarhos, "A ^{129}Xe NMR Study of Functionalized Ordered Mesoporous silica", *J. Phys. Chem. B.*, **106** (2002) 5938-5946.

La ciencia y la tecnología de los materiales: una visión prospectiva para México

David Ríos Jara, Instituto de Investigaciones en Materiales, UNAM, en estancia sabática del Centro de Investigación en Materiales Avanzados, CIMAV.

Introducción

Desde el inicio de la civilización, los avances de la humanidad han sido posibles gracias al descubrimiento de un material, o un conjunto de ellos, que ha permitido cambios trascendentes en las relaciones de poder entre los pueblos y en las formas de vida de las sociedades que los utilizan. En efecto,¹ su importancia es tan grande que le dan nombre a las primeras etapas de nuestra civilización. Así, se identifica a la edad de piedra (?-6000 a.C.), en la que los hombres utilizaron estos materiales cerámicos para fabricar las primeras herramientas y armas para cazar y guerrear. Más tarde se inicia la edad del bronce (2000-600 a.C.) y posteriormente la del hierro (1000 a.C. hasta nuestros días), material que sigue teniendo una gran importancia en la actualidad, sobre todo en forma de acero. En los

tiempos modernos, el avance de un país continúa basándose en la generación de nuevos materiales desarrollados por expertos en varias disciplinas: físicos, químicos, ingenieros, arquitectos y médicos, así como industriales, que crean con ellos una gran diversidad de aplicaciones para el bienestar de la sociedad. En cuanto a la era actual, la mayoría de las opiniones coinciden en llamarla la edad del silicio, dada la importancia de este material en el avance de la electrónica, las telecomunicaciones, la capacidad de cómputo y otras tecnologías que actualmente disfrutamos.

El estudio sistemático de los materiales mediante lo que actualmente se conoce como ciencia e ingeniería de materiales se inició apenas en la década de los cuarenta del siglo pasado, ya que anteriormente éstos se usaban y producían con una do-



D. Paula Santiago, 2001. Técnica mixta (60 x 42 x 42 cm). Detalle.

sis grande de empirismo. La ciencia de los materiales surgió como resultado de la aplicación de los desarrollos científicos de la física y la química. Por ejemplo, el conocimiento preciso de la relación entre la estructura y las propiedades de los materiales fue posible gracias a los descubrimientos en el campo de la química y al advenimiento de la mecánica cuántica aplicados al comportamiento de la materia en estado sólido.

Por otro lado, la necesidad de mejorar las propiedades de los materiales y de desarrollar rutas de procesamiento económicamente viables ha hecho surgir la ingeniería de materiales. Tanto la ciencia como la ingeniería de materiales son

Los materiales dan nombre a las etapas de nuestra civilización

aproximaciones a una disciplina que puede definirse como el estudio integrado de la síntesis, el procesamiento, la estructura, las propiedades y el desempeño de un material. El edificio de la ciencia e ingeniería de los materiales se construye con el desarrollo balanceado de estos cinco aspectos y con el conocimiento de la interrelación existente entre ellos, como se muestra en la figura 1. Por esta razón, la ciencia y la ingeniería de los materiales es un área eminentemente multidisciplinaria, en la que concurren necesariamente las capacidades tanto de físicos, químicos e ingenieros, como de matemáticos,

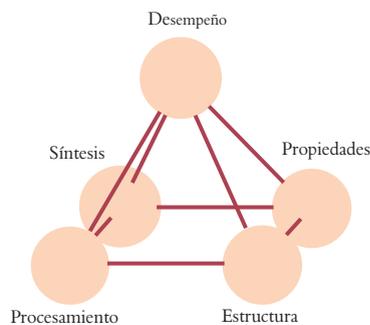


Figura 1. Los cinco diferentes aspectos que construyen el edificio de la ciencia y la ingeniería de los materiales.

biólogos, médicos, odontólogos e incluso restauradores de arte, entre otros.

Partiendo de lo que están hechos, los materiales suelen clasificarse en metálicos (hierro, cobre, aluminio, bronce, níquel, titanio, etc.), cerámicos (ladrillos, vidrio, cemento, aislantes, abrasivos, etc.), poliméricos (caucho, plásticos diversos, varios tipos de adhesivos, etc.), semiconductores (silicio, germanio, arsenuro de galio, etc.) y otros, más complejos, llamados compuestos, que son mezclas de dos o más de los mencionados.

Dependiendo de su complejidad estructural y funcional, los materiales se clasifican en dos grupos: los materiales tradicionales y los materiales avanzados.

Los primeros forman parte integral de nuestra vida cotidiana, se encuentran en las construcciones en las que trabajamos o habitamos, en nuestras prendas de vestir o en los productos cosméticos, en nuestros automóviles, sus ruedas de caucho vulcanizado y el asfalto derivado del petróleo por el que transitan, en fin, en casi todo lo que nos rodea. Todos estos son materiales tradicionales y se usan en la construcción de todo tipo de objetos, grandes y pequeños, modernos o antiguos. En general son materiales cuya utilidad reside en sus propiedades mecánicas (resistencia mecánica) y en su bajo precio, se producen en cantidades masivas (*commodities*) y están a la vista por todas partes. Sin embargo, el valor agregado asociado a la comercialización de los materiales tradicionales es reducido: se calcula que para estos materiales el precio de venta promedio es tan bajo como un dólar por kilogramo aproximadamente². Además, la competencia internacional es terrible y los nichos de oportunidad muy escasos.

En contraste con los anteriores, existen otros materiales mucho menos evidentes y que no obstante son impresionables en numerosas aplicaciones y

dispositivos que actualmente ya consideramos cotidianos: se trata de los materiales avanzados y su utilidad reside no tanto en sus propiedades mecánicas, sino en sus propiedades químicas, magnéticas, ópticas y/o electrónicas, entre otras. Los materiales avanzados tienen una carga tecnológica alta y un elevado valor agregado. Se calcula que el precio de venta promedio de estos materiales alcanza mil dólares o más por kilogramo² y en este costo el porcentaje correspondiente a la materia prima es sólo una pequeña parte. Aquí los nichos de oportunidad son mayores, por lo que los países industrializados se han concentrado en ellos, buscando mayor rentabilidad económica.

Actualmente hay un gran número de avances tecnológicos basados en el desarrollo de nuevos materiales. Nuestro entorno tecnológico contiene un número significativo de objetos dotados de propiedades físicas y químicas difíciles de imaginar hace pocas décadas. Tales materiales pueden representar sólo una pequeña parte de los dispositivos en los que actúan, pero cumplen en ellos un papel estelar.

Consideremos por ejemplo las figuras 2 a 7, que muestran la evolución de ciertas propiedades de los materiales con respecto al año de su descubrimiento. En ellas se aprecian los significativos avances en diferentes aspectos del comportamiento de los materiales tradicionales y avanzados en los últimos años.

Otros ejemplos de estos nuevos materiales son la nueva generación de bio-

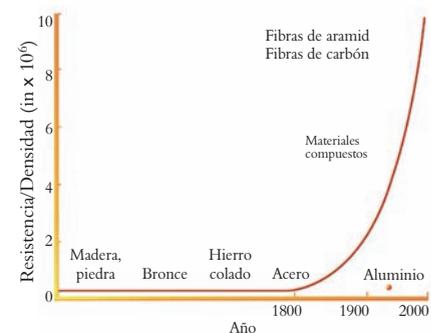


Figura 2. Evolución de la resistencia mecánica de diversos materiales en función del año de su descubrimiento.

materiales (materiales compatibles con el cuerpo humano) para su uso en implantes y prótesis; materiales para la conversión de energía solar en aplicaciones eléctricas; materiales poliméricos para la fabricación de transistores flexibles, tubos fluorescentes o cintas y discos de video; plásticos que conducen la electricidad; cerámicas dúctiles capaces de soportar temperaturas muy elevadas sin deformarse; nuevos materiales para pantallas planas de televisión y computadoras y muchos otros aparatos y dispositivos de uso diario

Tendencias mundiales

En los últimos años se ha producido un desarrollo explosivo de la ciencia y la tecnología de los materiales, específicamente en el sector de los materiales avanzados. Esta situación es particularmente notoria en los países más industrializados, impulsados por los requerimientos de un mercado en rápido crecimiento. En estos países se discuten continuamente y al más alto nivel aspectos relacionados con la definición de estrategias nacionales en el campo de los materiales y las tecnologías que de ellos se derivan.

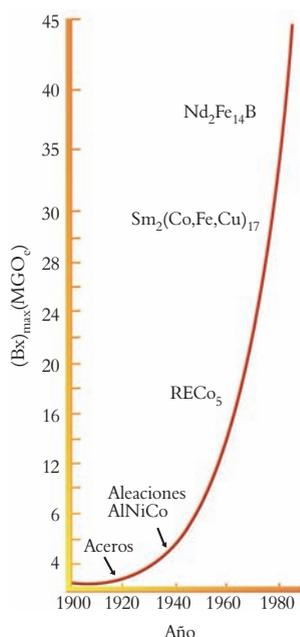


Figura 3. Evolución de la magnetización en imanes permanentes en función del año de su descubrimiento.

También es de interés global la necesidad de reducir costos energéticos en la producción de materiales, la biodegradabilidad y la recuperación o reciclado de desechos y subproductos.

En el futuro próximo se prevé el advenimiento de una familia de materiales avanzados más complejos, con capacidad de autodiagnóstico y autorreparación, que incorporan funciones programadas como sensoras y actuadoras. Esta familia se conoce como “materiales inteligentes”, porque tienen la habilidad de responder ante estímulos externos y de adaptar sus características a las solicitudes del entorno: son capaces de “sentir” y “actuar” como consecuencia del estímulo, al integrar en el mismo material aspectos estructurales y funcionales. Los seres vivos proporcionan la mejor analogía con los materiales inteligentes, ya que cuentan con funciones de autodiagnóstico y autorreparación; esto, que la naturaleza es capaz de hacer automáticamente, supone un reto descomunal ante el que, sin embargo, comienzan a surgir las primeras propuestas en forma de dispositivos que integran inteligencia, multifuncionalidad y autonomía.

Dentro de las tendencias mundiales actuales destacan la de los biomateriales³ y los nanomateriales⁴ para la fabricación de dispositivos de aplicaciones muy diversas. En relación con los biomateriales, su gran variedad se hace patente cuando tratamos de enumerar algunas de sus áreas de aplicación actuales o con proyección al futuro: materiales bioactivos (actúan como el órgano que sus-

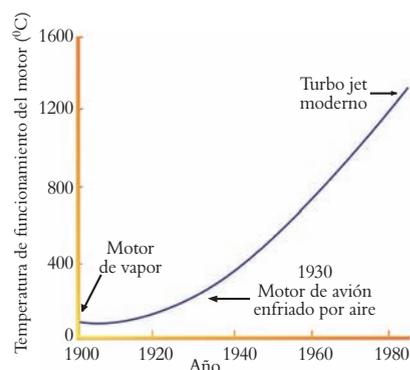


Figura 4. Evolución de la temperatura de operación de los motores (eficiencia) en función del año de su invención.

tituyen) y biodegradables (que con el tiempo no resulten venenosos para el ambiente), bioinertes (que no reaccionan a nivel químico con su entorno); biodispositivos para dosificación controlada de fármacos y para la regeneración de tejidos, nuevas formulaciones de sellos dentales a base de monómeros acrílicos bifuncionales y sistemas de fotocatalisis con luz visible, etcétera.

En el ámbito de los nanomateriales, entendidos como estructuras con alguna de sus dimensiones por debajo de los 100 nm (un nanómetro es la millonésima parte de un milímetro), sobresalen las actividades relacionadas con nanopartículas (semiconductoras, metálicas, nanocompuestos, óxidos metálicos); nanoestructuras novedosas (fulerenos, nanotubos de carbono, nanoalambres, pozos, alambres y puntos cuánticos, entre otros), nanopelículas (metálicas, semiconductoras y dieléctricas) y polímeros nanoestructurados (polímeros en bloques de tamaño nanométrico y compósitos).

La industria de los nanomateriales se basa en la manipulación de la materia, en la escala del nanómetro, para la fabricación de estructuras con estas dimensiones. El desarrollo de los nanomateriales busca explotar las nuevas propiedades físicas y químicas que se presentan en la nanoescala. Así, la dimensión se convierte en una variable más en el diseño de nuevos materiales, ya que para una composición química y una estructura fijas, propiedades como el color o la temperatura de fusión, entre muchas otras, dependen ahora del tamaño. Baste re-

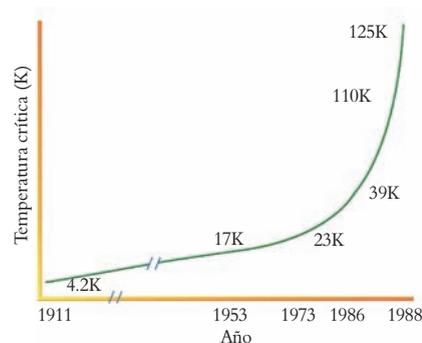


Figura 5. Evolución de la temperatura crítica a partir de la cual se presenta el fenómeno de la superconductividad en función del año de su descubrimiento.

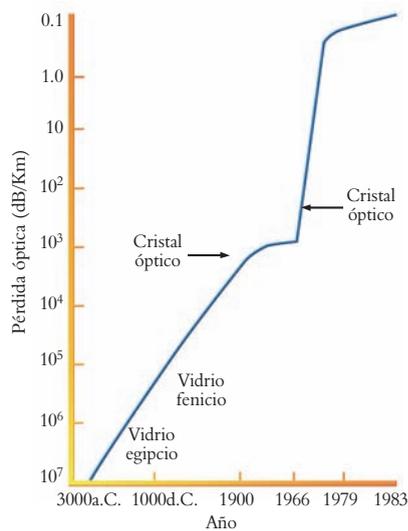


Figura 6. Evolución de la capacidad de transmisión de luz de diversos materiales en función del año de su descubrimiento.

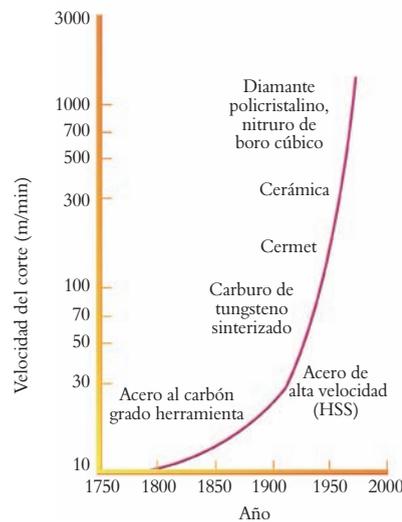


Figura 7. Evolución de la velocidad de corte de herramientas fabricadas con diferentes materiales en función de la fecha de su desarrollo.

cordar que los materiales basados en nanotubos (estructuras nanométricas en forma de tubo) han alcanzado resistencias mecánicas cien veces mayores que

los sistemas nanoestructurados hace posible que materiales “tradicionales” presenten nuevos comportamientos que modifican notablemente sus pro-

Los biomateriales y los nanomateriales revolucionarán la industria

las del acero, con un sexto de su peso. En este ámbito convergen la física, la química y la biología, pues la escala de los nanomateriales coincide con la de las proteínas y otras macromoléculas que se encuentran en la base de la vida, así como con la de varias estructuras intracelulares e incluso con la de organismos vivos como las nanobacterias y los virus. De esta convergencia resulta una comunión de métodos y un potencial de desarrollo de sistemas híbridos que podría revolucionar toda la industria en un plazo aproximado de veinte años. En la actualidad, esta industria representa más de cincuenta mil millones de dólares a escala global y los analistas predicen que llegará a cuatrocientos mil millones de dólares anuales en 2015.⁵

El predominio de los llamados efectos cuánticos de tamaño en muchos de

propiedades ópticas, eléctricas, mecánicas, catalíticas, etc. Adicionalmente, el empleo de estas nanoestructuras contribuirá a la integración cada vez más intensiva de dispositivos en dimensiones muy reducidas. Uno de los ejemplos sobre-

salientes de miniaturización fue desarrollado por la compañía Intel, que está produciendo actualmente memorias SRAM (*Static Random Access Memory*) que contienen más de un millón y medio de transistores por milímetro cuadrado. En este sentido conviene recordar los materiales fotorrefractivos, que se desarrollan con el propósito de almacenar enormes cantidades de información en tres dimensiones, lo que supone otra revolución en la materia.

Estructuras más complejas que también representan avances de frontera son los MEMS y NEMS (micro y nanomáquinas electromecánicas), que integran capacidades de las máquinas convencionales que utilizamos cotidianamente (macroscópicas), pero a escalas micro y nanométricas, respectivamente.

Otra revolución científica y tecnológica ocurrió hace unos pocos años, esta vez en el área de los polímeros: se trata de la polimerización radicalica controlada o viviente. Este método se propone para controlar la polimerización por el mecanismo de radicales libres. ¿Por qué es tan importante? Las razones son costo y versatilidad. Alrededor de 60 por ciento de los polímeros en el mundo se sintetizan actualmente por el mecanismo de radicales libres. El método se usa también para una gran diversidad de monómeros, se lleva a cabo en condiciones moderadas y es tolerante a impurezas y humedad. Por eso fue posible el desarrollo de la polimerización en emulsión y suspensión, en las que el medio continúa siendo agua.

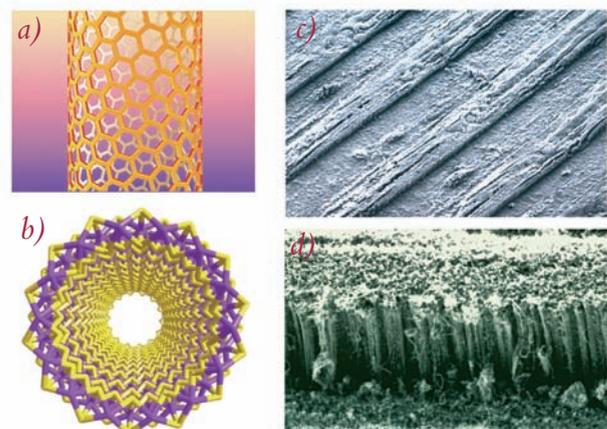


Figura 8. Nanotubos de carbono. a) y b) Vistas lateral y frontal de un modelo de nanotubo. c) y d) Fotografías de microscopio electrónico de barrido de mazos de fibras de carbono crecidas en el IPICYT. Cortesía de M. y H. Terrones.

Los materiales espintrónicos son otro ejemplo de materiales que se encuentran actualmente en la frontera de la ciencia y la tecnología. Los dispositivos basados en ellos, además de utilizar la propiedad de carga eléctrica negativa del electrón, también usarán una propiedad intrínseca descrita por la física cuántica: su espín. Entre otras aplicaciones, su empleo en la computación ayudará a incrementar de manera importante la velocidad de procesamiento de datos.

En el área de la energía, los materiales son también una pieza clave. Por ejemplo, en el caso de las celdas de combustible, basadas en la muy conocida reacción exotérmica que ocurre durante la recombinación de hidrógeno y oxígeno, y que han generado grandes expectativas por las implicaciones económicas y medioambientales que encierran; su aplicación práctica masiva deberá, sin embargo, pasar primero por el estudio y el desarrollo de nuevos materiales. De manera similar, los nuevos superconductores de alta temperatura, cuyo uso potencial está aún latente, podrán resolver una amplia gama de problemas tecnológicos, en particular aquellos relacionados con la transmisión eficiente de energía.

Situación actual en México

México cuenta con varias instituciones tanto públicas como privadas que realizan actividades en el ámbito de los materiales. Entre las públicas se encuentran la UNAM, el IPN, la UAM, el IMP, el CINVESTAV, el CIMAV, el COMIMSA, el CIQA, el IPICT, el CICY, el CI-

B. Paula Santiago,
2001. Técnica mixta
(50 x 22 x 22).
Detalle.



productiva. El censo nacional de los recursos humanos especializados que trabajan en el área de los materiales y en otras afines dentro de la física, la química y la ingeniería, arroja un total aproximado de mil investigadores.⁶ Esta cifra no es comparable con los aproximadamente ciento cincuenta mil investigadores que en Estados Unidos llevan a cabo actividades similares.⁵

Algunos centros de investigación y desarrollo de empresas privadas realizan también actividades en el área de materiales, entre los que se cuentan Grupo

cano a las actividades de investigación y desarrollo tecnológico en materiales, vivió una etapa de recesión económica caracterizada por una importante pérdida de empleos, particularmente acusada durante 2001. Sólo partir de mediados de 2002 se pudieron apreciar signos de recuperación, de tal manera que al cierre de 2004 hubo un incremento de 3.8 por ciento.⁷

Otro dato relevante es el de las patentes solicitadas por mexicanos en México,² que asciende a casi quinientas de un total aproximado de 13,000 al año, que es un indicador claro de la muy escasa generación de tecnología en el país, tanto por parte de la industria como de la academia.

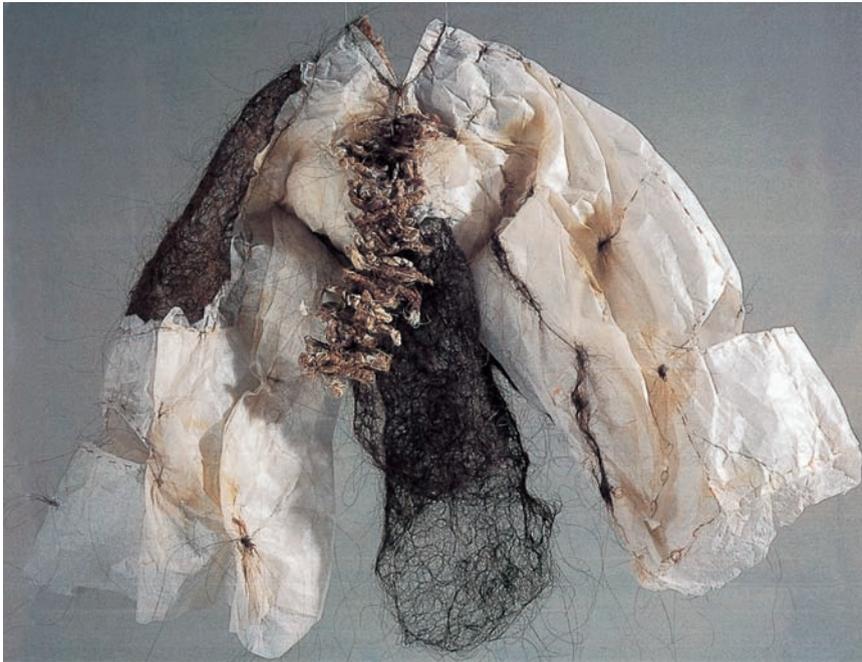
Actualmente la planta productiva mexicana está fuertemente orientada hacia la comercialización de materiales tradicionales, con un consumo elevado de materia prima y un bajo valor agregado, con la consecuente pérdida de competitividad. En los países industrializados, la tecnología de materiales ha sustituido a la materia prima como principal factor de competencia. Así, tener grandes riquezas naturales está dejando de ser un

Los materiales espintrónicos se encuentran en la frontera de la ciencia

CESE, la U de G, la UANL, la UASLP, la BUAP y la UAS, ubicadas en diferentes estados de la república. Si bien se han creado algunos grupos de calidad que realizan investigación en materiales, el número de especialistas y la infraestructura disponible no atiende al amplio universo de requerimientos de la planta

DESC, Vitro, CEMEX, Mabe, Peñoles, Hylsa, GCC y ConduMex, por nombrar sólo algunos; sin embargo, todavía son pocas las opciones de investigación y desarrollo tecnológico que brindan apoyo a la industria del país.

En el ámbito nacional, la industria manufacturera, que es el sector más cer-



LIM. Paula Santiago, 2000. Técnica mixta. (58 x 48 x 25). Detalle

factor de ventaja comercial en el mercado mundial.

En general el aparato productivo mexicano en el campo de los materiales se caracteriza por su escaso contenido tecnológico. Muy pocas industrias nacionales pueden considerarse como de clase mundial, con inversión decidida en desarrollo de tecnología propia. La gran mayoría de las empresas del sector cuenta aún con tecnologías “caseras” o importadas, lo que tuvo su origen en el alto nivel de proteccionismo comercial experimentado en el país en la década de los setenta y la primera mitad de los años ochenta del siglo pasado. Tal proteccionismo condujo al aprovechamiento excesivo de las ventajas comerciales por encima de las inherentes al desarrollo tecnológico propio, lo que generó en el industrial mexicano una cultura de comerciante más que de empresario.

A partir de la apertura comercial de la segunda mitad de los años ochenta, formalizada con la firma del Tratado de Libre Comercio con Estados Unidos y Canadá (TLC), se inaugura una etapa de establecimiento masivo de tratados similares con los países de Europa, América Latina y Asia (más de treinta actual-

mente). En este contexto, la industria nacional de los materiales se encuentra frente a un reto mayúsculo: modernizar su aparato productivo y crear tecnología propia para hacer frente a la competencia internacional.

La obsolescencia que en general se observa en los procesos de producción en la industria nacional afecta la calidad y el costo de los materiales, de ahí la urgencia de desarrollar tecnologías que incorporen un mayor empleo del conocimiento.

El país cuenta con el potencial para producir materiales con mayor valor agregado para atender la demanda de las

industrias de alta tecnología, por lo que un elemento a considerar es el enfoque orientado a cubrir las necesidades de nuestra industria. Aquí es importante considerar un balance entre el desarrollo de los nuevos materiales o materiales avanzados y el apoyo a la planta productiva existente en el país que requiere investigación en materiales tradicionales. En este sentido, un cambio gradual de nuestras industrias hacia los nuevos materiales parece el camino más viable para conseguir la competitividad que se busca.

Está claro que en el contexto nacional deben hacerse esfuerzos importantes para poner a nuestro país en igualdad de condiciones para competir con otros en el campo de los materiales. Algunas acciones relevantes están orientadas tanto a promover la vinculación entre la academia y la empresa como a dar incentivos a la inversión que haga la industria en ciencia y tecnología, acciones que en otros países son una constante. En México, aunque en los últimos años ha habido un esfuerzo en ese sentido, el resultado es aún insuficiente como para representar un cambio en los esquemas tradicionales de producción y de generación de conocimiento propio de la planta productiva. Además, los esquemas explorados generalmente dejan fuera a las micro, pequeñas y medianas empresas, definidas por su tamaño de acuerdo con la tabla 1, que representan un factor determinante para la generación global de riqueza y empleo. Estas micro, pequeñas y medianas empresas constituyen 99.6 por ciento del total de las industrias nacionales y generan aproximadamente

Tabla 1. Participación porcentual de los diferentes tipos de empresas en los sectores de actividad económica⁷

| Tamaño | Sector | | | Total 2,844,308 |
|---------|-----------|----------|------------|--------------------|
| | Industria | Comercio | Servicios* | |
| Micro | 94.4 | 94.9 | 97.4 | 95.7 |
| Pequeña | 3.7 | 4 | 1.6 | 3.1 |
| Mediana | 1.7 | 0.9 | 0.5 | 0.9 |
| Grande | 0.4 | 0.2 | 0.4 | 0.3 |
| Total | 100 | 100 | 100 | 100 |

*Composición por tamaño y sector (participación porcentual)

85 por ciento de los empleos del sector, sin embargo contribuyen sólo en 20 por ciento a la generación de capital.⁷

Conclusiones

El panorama descrito debiera conducirnos a una seria reflexión en torno a los cambios profundos, acelerados y con un importante grado de conocimiento que se viven en el mundo, pues la influencia de la tecnología en la sociedad es una de las características más significativas de los tiempos en que vivimos. Además, es evidente que la tecnología continuará siendo el agente de cambio social por excelencia, es decir, el determinante del desarrollo de las sociedades futuras; por otra parte, las aplicaciones descritas prevén un futuro en el que los desarrollos en estas áreas cambiarán radicalmente nuestra forma de vida.

Es tiempo de que México, sin dejar de generar riqueza a partir de los materiales convencionales, aborde el tren de

los materiales avanzados. La complejidad de las redes inherentes a los procesos de globalización en que nos encontramos insertos nos obligan a mejorar nuestra posición competitiva y para ello es preciso contar con un sector productivo que se caracterice por una verdadera voluntad de innovación y visión de futuro.

En general se requiere la creación de infraestructura científica y tecnológica

México debe producir materiales con mayor valor agregado para modernizar su planta industrial

en el sector de los materiales y específicamente en el subsector de los materiales avanzados. Asimismo, es urgente el establecimiento de bancos de datos, laboratorios nacionales y centros de in-

vestigación y desarrollo, que dinamicen las tareas de la ciencia y el desarrollo tecnológico. En particular resulta pertinente la creación de laboratorios nacionales en áreas que son de interés común para un número considerable de grupos de investigación y desarrollo en el país, tales como la caracterización de materiales por técnicas de microscopía electrónica, preparación y caracterización de pelícu-

las delgadas y simulación y modelación matemática, entre otros. Debe considerarse que las inversiones pulverizadas que se han hecho hasta ahora para dotar a las instituciones de esa infraestructura no han considerado el mecanismo de optimización de recursos ni el uso eficiente que podría lograrse con el establecimiento de esos laboratorios nacionales. Los avances actuales en comunicaciones permiten compartir adecuadamente ese tipo de infraestructura y evitar el mal uso de los escasos recursos disponibles.

Otra medida que resulta pertinente es la creación de bases de datos confiables y actualizadas de expertos nacionales en materiales. Ellos podrían ofrecer servicios de asesoría sobre aspectos tan diversos como compra de equipo industrial y de caracterización, elaboración de catálogos de materias primas, procesos industriales, capacitación, etcétera, lo que optimizaría el desempeño del sector productivo nacional, que actualmente tiene que apoyarse en las asesorías ofrecidas por expertos y firmas de consultoría extranjeros. Este mecanismo tiene la ventaja adicional de promover la interacción entre la academia y la industria, que actualmente representa uno de los retos más importantes para la modernización del país.

En este último tenor, conviene considerar programas de movilidad de personal de la academia hacia la industria y



MAR. Paula Santiago, 2001. Técnica mixta (55 x 25 x 25).

viceversa, mecanismo que probadamente genera interacciones de largo plazo entre ambos sectores; esto implica, por supuesto, la correspondiente creación de programas de incentivos y un cambio en la mentalidad de las comunidades académicas.

Adicionalmente deben fortalecerse las instituciones de educación superior y los centros de investigación relacionados con la ciencia de los materiales. Este fortalecimiento deberá considerar tanto la infraestructura de laboratorios, equipamiento y plazas de profesores e investigadores como becas para estudiantes de pre y posgrado. Resulta también conveniente la elaboración de programas de estudio en el nivel de licenciatura que aborden esta disciplina de manera temprana.

Es importante hacer notar que, a pesar de lo reducido de la comunidad científica y de la infraestructura de alto nivel, nuestro país cuenta con investigadores y grupos de investigación que desarrollan proyectos en la frontera de la ciencia y la tecnología de los materiales. Sin embargo, para estar en condiciones de producir un cambio social y económico de importancia, es necesario incrementar en forma considerable y decidida los apoyos, tanto públicos como privados, destinados a la investigación científica y

tecnológica y a la formación de recursos humanos. Por otra parte, deberá fomentarse la colaboración interdisciplinaria entre física, química, matemáticas y la ciencia y la ingeniería de los materiales a través de la creación de proyectos en los que se involucren actividades complementarias para el desarrollo de produc-

toma intuitiva de decisiones. En estas tareas de diagnóstico y prospectiva, los expertos nacionales tendrán un papel muy relevante, pero la participación activa de las dependencias de gobierno pertinentes y de representantes de los sectores industriales resultará definitiva; para lograrlo se requiere articular voluntades y

Es importante la interacción entre la academia y la industria en el área de los materiales

tos y procesos para la industria. Asimismo, deberá apoyarse a las instituciones nacionales con programas que hagan atractiva la estancia de profesores extranjeros de alto nivel, que produzcan un efecto multiplicador en las capacidades locales. Otro aspecto importante es la difusión de la relevancia de la ciencia de los materiales hacia la sociedad, en tanto que primera usuaria y beneficiaria de esta actividad.

El ejercicio de planeación al más alto nivel resulta ya inaplazable, en tanto que seguimos comprometiendo el futuro de nuestro país con acciones pendulares, derivadas en muchas ocasiones de una

recursos, así como focalizar los esfuerzos. Es cierto que los niveles de financiamiento son limitados y deben incrementarse si se quiere dar al país la posibilidad de desarrollo en un ambiente de competitividad global, pero también es verdad que es posible multiplicar los recursos disponibles si los diferentes grupos y sectores ahora dispersos, con un afán colaborativo y con un objetivo común, enfrentamos el reto de brindar a este país la posibilidad de incrementar su productividad y competitividad a través de la vía del desarrollo científico y tecnológico en áreas del conocimiento como son los materiales y en particular los materiales avanzados. ■



C. Paula Santiago, 2001. Técnica mixta y base de mármol (14 x 14 x 14 cm). Detalle.

Bibliografía

- ¹ G. Aguilar Sahún, *El hombre y los materiales*, La ciencia para todos 69, Fondo de Cultura Económica, México, 1998.
- ² G. Villalobos, información pública del Conacyt, 2001.
- ³ J. Méndez Nonell, "Biomateriales para un mayor promedio de vida", *Ciencia y Desarrollo*, septiembre–octubre 2004.
- ⁴ J. González Hernández, "Nanotecnología", *Ciencia y Desarrollo*, septiembre–octubre. 2004.
- ⁵ *Materials Science and Engineering for the 1990's*, National Academy of Sciences, 1989.
- ⁶ Padrón de investigadores del Sistema Nacional de Investigadores (SIN).
- ⁷ INEGI, Censos Económicos, Sector Manufacturero, www.inegi.gob.mx

Aleaciones magnéticas con memoria de forma

David Ríos Jara, Instituto de Investigaciones en Materiales, UNAM, en estancia sabática del Centro de Investigación en Materiales Avanzados, CIMAV.

Introducción

La capacidad de algunos materiales para deformarse en presencia de un estímulo externo es bien conocida y ha sido utilizada en numerosas aplicaciones prácticas. Así, propiedades como la elevada dilatación térmica de ciertas aleaciones metálicas permite regular la temperatura en los calentadores de agua de nuestras casas. La piezoelectricidad, es decir la capacidad de algunos cristales y compuestos metálicos y cerámicos para deformarse al aplicarles un campo eléctrico (un voltaje o diferencia de potencial) entre una y otra de sus caras, ha encontrado una gran variedad de aplicaciones que van desde sistemas de refrigeración, microscopios de fuerza atómica, actuadores automotrices y encendedores de gas hasta todos los equipos de generación y detección de ultrasonido utilizados en medicina

y en la inspección no destructiva de estructuras metálicas. Ejemplos de estos materiales piezoeléctricos son el cuarzo, la sal de Rochelle, el titanato de zirconio y plomo (conocido como cerámica PZT) y recientemente las fases de aurivillius (óxidos de Bi y Ti).¹

Desde 1842 James P. Joule observó que algunos materiales cambian sus dimensiones al aplicarles un campo magnético: este es el fenómeno de la magnetostricción. Este cambio dimensional, sin embargo, es en general muy pequeño; por ejemplo, en materiales ferromagnéticos convencionales como el hierro (Fe), el cobalto (Co) y el níquel (Ni) es sólo del orden de 10^{-4} a 10^{-5} por ciento, e incluso en materiales que a partir de los años sesenta del siglo XX causaron grandes expectativas de aplicación tecnológica como el terfenol-D (compuestos



Homenaje a Mondrian. Patricia Llopis, 2005. Acrílico sobre tela. Detalle.

de terbio (Tb), disprosio (Dy) y hierro (Fe), la deformación es sólo del orden de 0.1 por ciento.

En 1996 se descubrió un nuevo fenómeno² que combina dos propiedades interesantes de algunas aleaciones metálicas: el ferromagnetismo y el efecto memoria de forma, la combinación de estos efectos en un mismo material permite obtener deformaciones de hasta 10 por ciento al aplicar un campo magnético de aproximadamente medio tesla. Tales características abren un nuevo panorama para posibles usos en los que se requiere inducir una deformación importante en presencia de un campo magnético (figura 1). Como hay muchas y muy variadas aplicaciones, se ha incrementado el interés de científicos e ingenieros en el ámbito internacional: los primeros para entender el fenómeno y los segundos para aprovecharlo.

El efecto memoria de forma

Existen varias familias de aleaciones metálicas que presentan el efecto memoria de forma, entre las que se cuentan las basadas en cobre (CuAlNi, CuZnAl y CuAlBe, entre otras), las de TiNi (TiNiCu, TiNiFe), las de Cd (AuCd y AgCd) y las magnéticas (base Fe, NiMnGa y NiMnAl, entre otras). En todas ellas se observa una transformación de fase en estado sólido, entre una fase que es estable a altas temperaturas (típicamente superiores a 500 °C) y otra fase que es metaestable a temperaturas bajas

(cercanas a la temperatura ambiente o menores).

La fase de alta temperatura se conoce genéricamente como austenita (nombre

utilizado originalmente para la fase correspondiente en los aceros) y el intervalo de temperaturas en el que es estable depende de la aleación particular y de su composición. Esta fase puede ser “congelada” a temperaturas más bajas (cercanas a la temperatura ambiente o menores), mediante un enfriamiento rápido desde la región de estabilidad. Aunque a estas temperaturas la fase no es estable, la aleación puede permanecer en estado metaestable por periodos muy largos (años), por lo que para fines prácticos puede considerarse como estable.

En la región de estabilidad a altas temperaturas, la austenita tiene una estructura cristalográfica desordenada, es decir que los átomos que forman la aleación ocupan sitios al azar en su estructura cristalina; sin embargo, a temperaturas inferiores, la es-

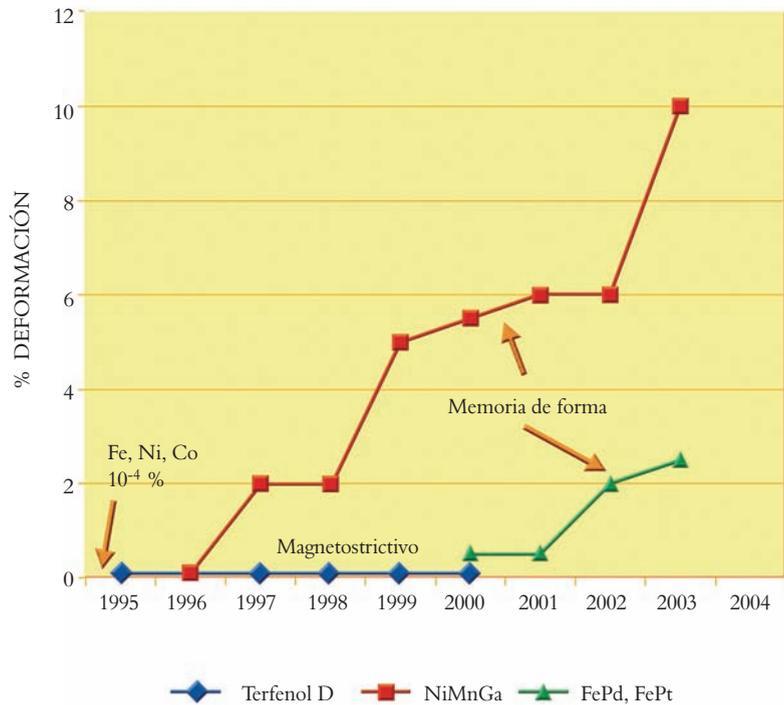


Figura 1. Evolución histórica del porcentaje de deformación asociado con la magnetostricción y el efecto memoria de forma magnético.

Varias aleaciones metálicas tienen memoria de forma que depende de la temperatura

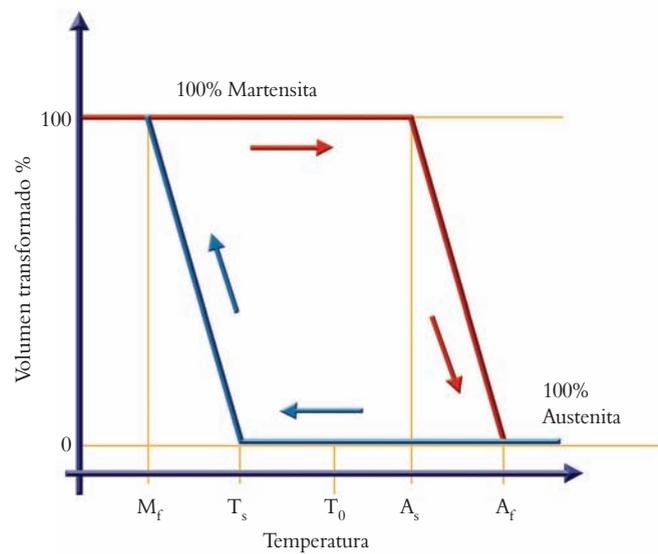


Los botines del bufón.
Patricia Llopis,
2005. Óleo sobre
madera.

estructura se ordena y los átomos ocupan posiciones bien definidas en la celda unitaria del cristal (orden químico).

Durante el enfriamiento, la fase ordenada de alta temperatura puede sufrir una transformación a otra fase, conocida como martensita (nombre que se origina también en los aceros) y que tiene las mismas características de metaestabilidad que la fase original (la austenita). La temperatura a la cual se inicia esta transformación de fase se conoce como M_s (*martensita start*) y la transformación termina completamente a una temperatura M_f (*martensita finish*). La diferencia entre estas dos temperaturas características depende nuevamente de la aleación de que se trate y de otros efectos complejos, pero típicamente es del orden de algunos grados centígrados ($< 20\text{ }^\circ\text{C}$). La transformación de fase se conoce como transformación martensítica (o transformación directa) y es reversible, es decir que si se calienta el material, éste se retransformara de martensita en austenita

Figura 2. Volumen transformado en función de la temperatura en una transformación martensítica. La histéresis que se observa es típica de una transformación de primer orden.



formación directa, por lo que se observa una histéresis (en temperatura) al efectuar un ciclo de transformaciones, es decir: austenita–martensita–austenita (figura 2).

La transformación directa es reversible si el material se calienta

(transformación inversa). Sin embargo, las temperaturas a las cuales se inicia y termina la transformación inversa no son las mismas a las que ocurre la trans-

La transformación martensítica tiene una característica muy importante: es una transformación “displaciva”, es decir que no involucra la redistribución de

los átomos presentes en las fases inicial y final (no hay difusión atómica), ya que ocurre mediante una deformación de corte o, lo que es equivalente, mediante un deslizamiento de planos atómicos particulares de la estructura cristalina de las fases y en direcciones cristalográficas muy específicas (figura 3). Tal característica ofrece la posibilidad de obtener la transformación martensítica con la aplicación de un esfuerzo externo, incluso a una temperatura superior a la que normalmente se inicia durante el enfria-

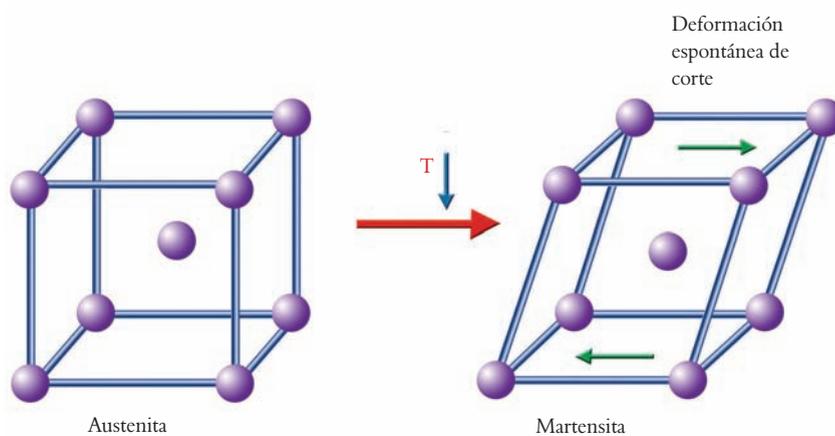


Figura 3. Deformación espontánea de corte asociada con la transformación martensítica obtenida al bajar la temperatura (la figura es esquemática, ya que el mecanismo es más complejo).



El zapato de los sueños. Patricia Llopis, 2005. Acrílico sobre tela.

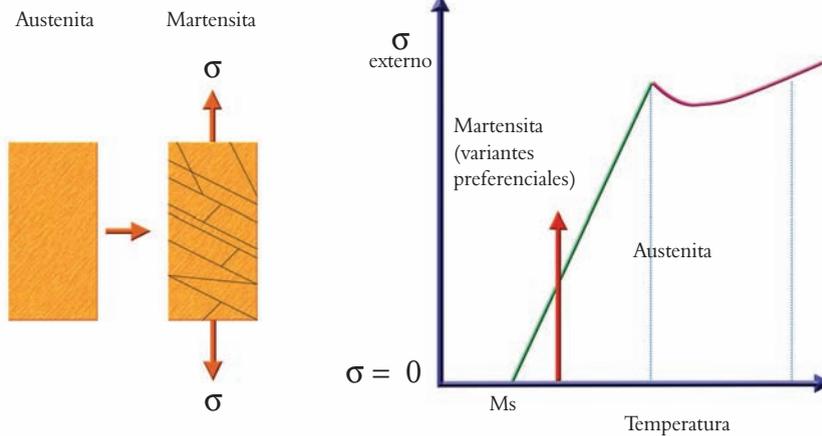


Figura 4. Obtención de la transformación martensítica mediante la aplicación de un esfuerzo externo. La transformación puede obtenerse a una temperatura mayor a M_s y el esfuerzo requerido depende linealmente de esa temperatura. Las variantes de orientación de martensita que se forman son aquellas compatibles con la dirección del esfuerzo externo.

miento (M_s), siempre que ese esfuerzo externo tenga la magnitud y dirección adecuadas para provocar la deformación de corte correspondiente (figura 4).

Con estos antecedentes podemos

principio en fase austenita (figura 5d). Nótese que tal recuperación de la forma ocurre sólo como resultado de la transformación inversa (al calentar), sin necesidad de ningún esfuerzo externo.

Un efecto complementario de la memoria de forma es el doble efecto memoria de forma

ahora entender en qué consiste el efecto memoria de forma, que aparece en la figura 5 de manera esquemática. Consideremos una muestra que en fase austenita tiene una forma o geometría particular (una barra, una placa, etc.) como en la figura 5a.

Al enfriarla a temperaturas inferiores a M_f , la muestra pasará a la fase martensita, es decir, tendrá una estructura cristalográfica diferente, pero su forma externa se mantendrá (figura 5b). Si a continuación la deformamos en fase martensita al aplicar un esfuerzo (σ), es decir la doblamos, estiramos o comprimimos, la muestra cambiará de forma externa (macroscópica) (figura 5c). El efecto memoria de forma consiste en que si ahora calentamos la muestra deformada para inducir la transformación inversa, ésta recuperará espontáneamente la forma macroscópica que tenía al

to la forma macroscópica de la fase de alta temperatura (austenita metaestable) como la correspondiente a la fase de baja temperatura (martensita deformada) al subir o bajar la temperatura y en ausencia de un esfuerzo externo; es decir, después del tratamiento termomecánico de educación, la muestra “aprende” cuáles son las formas macroscópicas que debe tener tanto en fase austenita a temperaturas mayores a las de transformación, como en fase martensita a temperaturas inferiores a las de transformación.

Estos fenómenos se han utilizado en diversas aplicaciones desde hace casi veinte años. Las aleaciones más comúnmente utilizadas son: TiNi, TiNiCu, CuAlNi y CuZnAl. Cabe mencionar que, como resultado de las propiedades mecánicas asociadas a las particularidades de la transformación martensítica, este tipo de aleaciones presenta otros efectos de gran interés científico y práctico —que no abordaremos en esta ocasión—, como los efectos “caucho” y

Un efecto complementario al anterior es el doble efecto memoria de forma (figuras 5d y e). En este último y como resultado de un tratamiento termomecánico (conocido como “educación”) la muestra adquiere espontáneamente tan-

superelástico y el amortiguamiento importante de vibraciones (en particular en la región de frecuencias del espectro audible).

Dada la naturaleza del mecanismo involucrado para inducir la transforma-

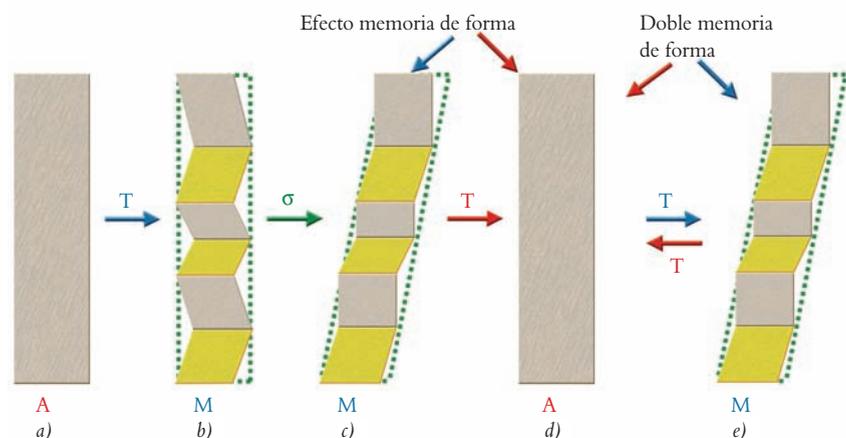


Figura 5. Esquema del efecto memoria de forma y del doble efecto memoria de forma.

ción, es decir los cambios en la temperatura de la muestra, el efecto memoria de forma se obtiene de manera muy lenta, ya que requiere la absorción (proceso endotérmico) o extracción (proceso exotérmico) de calor, para subir o bajar la temperatura respectivamente. La lentitud de tales procesos térmicos limita los posibles usos, ya que los restringe a aquellos en los que un ciclo de transformación no necesita velocidades mayores a aproximadamente un ciclo por segundo (1 hertz).

Las aleaciones magnéticas con memoria de forma

Aunque existen estudios preliminares sobre aleaciones magnéticas que muestran un incipiente efecto de memoria de forma, en particular en aceros, no fue sino hasta 1996 cuando una deformación importante, asociada a la aplicación de un campo magnético, se reportó en aleaciones de níquel (Ni), manganeso (Mn) y galio (Ga).²

Sólo las aleaciones no estequiométricas presentan el efecto memoria de forma

Las aleaciones Ni_2MnGa tienen también una fase austenítica de alta temperatura con una estructura cristalográfica ordenada de simetría cúbica centrada en las caras o fcc (conocida como Heusler L21), que presenta una transición paramagnética-ferromagnética cuando se enfría por debajo de 120 °C aproximadamente. La temperatura exacta de la transición depende de la composición y sólo las aleaciones no estequiométricas (es decir, aquellas cuya composición no coincide exactamente con la de dos átomos de níquel, uno de manganeso y uno de galio) presentan el efecto memoria de forma.

Esta fase ferromagnética puede transformarse en una fase martensítica a temperaturas menores (desde algunas decenas de grados centígrados por encima de la temperatura ambiente hasta temperaturas negativas). La fase martensítica puede presentar varias estructuras cris-

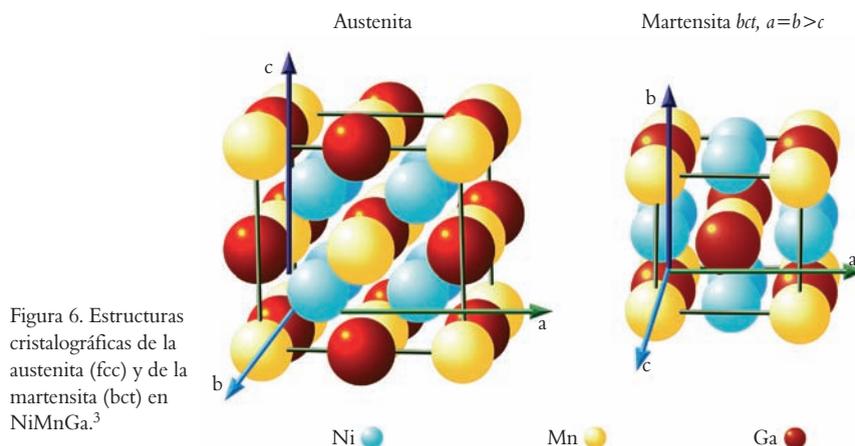


Figura 6. Estructuras cristalográficas de la austenita (fcc) y de la martensita (bct) en $NiMnGa$.³

talográficas, pero la estructura básica es una tetragonal centrada en el cuerpo o bct, que hereda el orden químico y el ferromagnetismo de la fase austenita. La figura 6 muestra las estructuras cristalográficas de la austenita y la martensita en aleaciones de Ni-Mn-Ga.³

Como ya mencionamos, el cambio estructural durante la transformación

ta deformación ocurre en planos cristalográficos de tipo (110) y en direcciones de tipo $\langle 110 \rangle$. Dado que se tienen doce planos equivalentes de tipo (110) y dos direcciones equivalentes de tipo $\langle 110 \rangle$ en cada uno de estos planos, se puede obtener un total de 24 variantes de orientación cristalográfica para la martensita a partir de un monocristal de austenita.

La aplicación de un esfuerzo externo al mismo monocristal de austenita en una dirección adecuada durante la transformación martensítica (al enfriarse), puede llevarnos a la obtención de sólo dos variantes de orientación de la estructura martensítica, en lugar de las 24 posibilidades mencionadas, como se

martensítica se obtiene mediante una deformación de corte y, en el caso de la estructura cúbica fcc de la austenita, es-

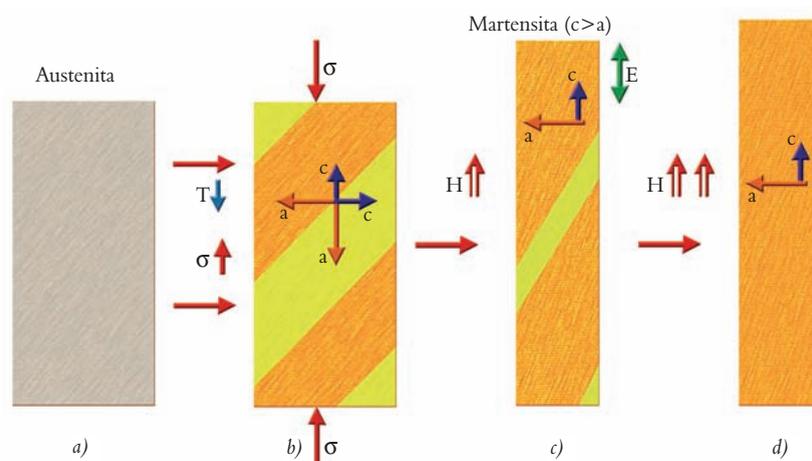


Figura 7. a) Esquema de la obtención de una importante deformación a partir de un monocristal de austenita. b) Un bicristal de martensita puede obtenerse mediante la aplicación de un esfuerzo externo mientras se disminuye la temperatura. c) y d) Una vez en estado martensítico y al retirarse el esfuerzo externo, la aplicación de un campo magnético externo en la dirección de fácil magnetización de la variante naranja induce el crecimiento de esta variante respecto de la otra.

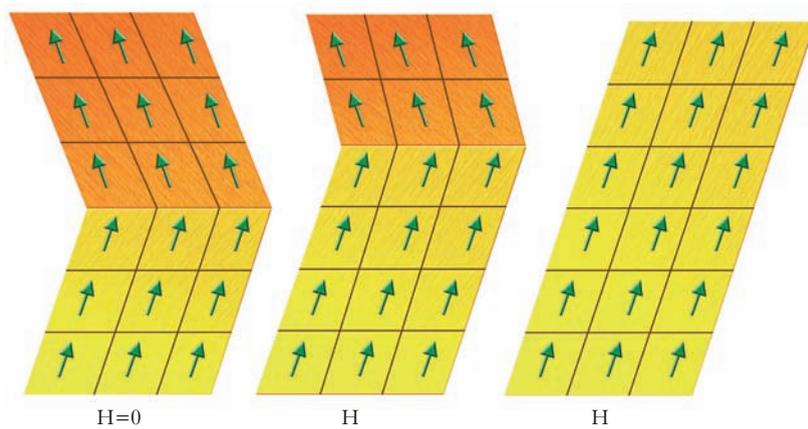
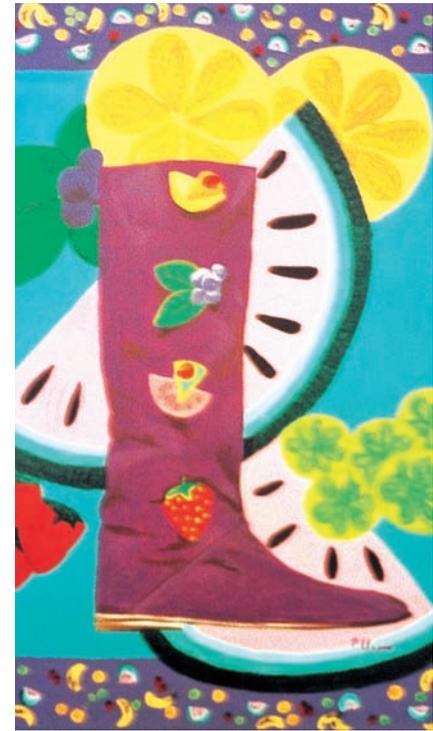


Figura 8. Movimiento de la frontera de macla entre dos variantes de martensita al aplicar un campo magnético creciente en la dirección del momento magnético de la variante amarilla.

ilustra en la figura 7. Estas dos variantes tienen orientaciones igualmente preferenciales respecto del esfuerzo externo y una vez formadas permanecen aunque ya no se ejerza el esfuerzo. Las dos variantes se encuentran en relación de "macla" una con respecto de la otra, es decir se tiene una simetría de espejo en-

con la posibilidad de reorientar el momento magnético de los dominios magnéticos en una de las variantes (figura 10), con lo cual se obtendría un efecto similar a la magnetostricción y una deformación macroscópica pequeña, ya que la región mantendría su orientación cristalográfica. La razón de que esto úl-



Tivo city kids. Patricia Llopis, 2005. Acrílico sobre tela.

La fase martensítica puede presentar varias estructuras cristalográficas; la básica hereda el orden químico y el ferromagnetismo de la fase austenita

tre las direcciones cristalográficas en ambas regiones y sus respectivos dominios magnéticos tienen un momento magnético orientado a 90° unos de otros (figura 8).

Si ahora aplicamos un campo magnético externo (del orden de medio tesla para las aleaciones Ni-Mn-Ga), observaremos el crecimiento de una de las variantes de martensita a expensas de la otra (figuras 7b y c y 9). Tal crecimiento origina una deformación macroscópica que, en el caso de estas aleaciones, puede alcanzar aproximadamente 10 por ciento.

El origen del fenómeno se encuentra en la posibilidad de mover la frontera entre las dos regiones de martensita.⁴ El movimiento de la frontera de macla, con el consiguiente crecimiento de una región a expensas de la otra, compete

timo no ocurra es que en estas aleaciones el vector momento magnético es muy anisotrópico, por lo que existe una dirección cristalográfica altamente pre-

ferencial para este vector; en tales condiciones, el campo magnético aplicado no es capaz de reorientar su dirección porque la energía requerida para ello es

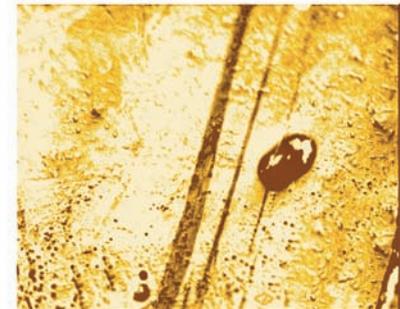
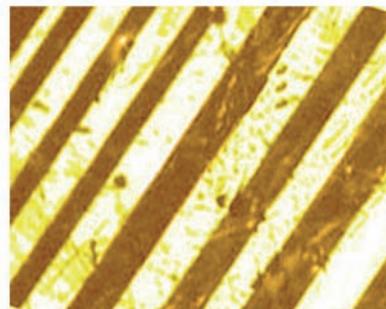


Figura 9. Imágenes de microscopía óptica de una aleación NiMnGa. a) Estado inicial de la muestra con dos variantes de orientación de martensita. b) Crecimiento de una variante a expensas de la otra como resultado de la aplicación de un campo magnético (0.7 tesla en este caso) en la dirección c de la variante favorecida.³

muy elevada. Antes de que dicha reorientación ocurra, la torca correspondiente a la fuerza ejercida por el campo magnético induce, en la zona contigua a la frontera de macla, la reorientación cristalográfica de la variante menos favorable mediante un ligero desplazamiento de los átomos, como se muestra en la figura 11. Así, esta zona adquiere la orientación cristalográfica de la variante más favorable. El movimiento de la frontera continúa y, conforme avanza, una región crece a expensas de la otra.

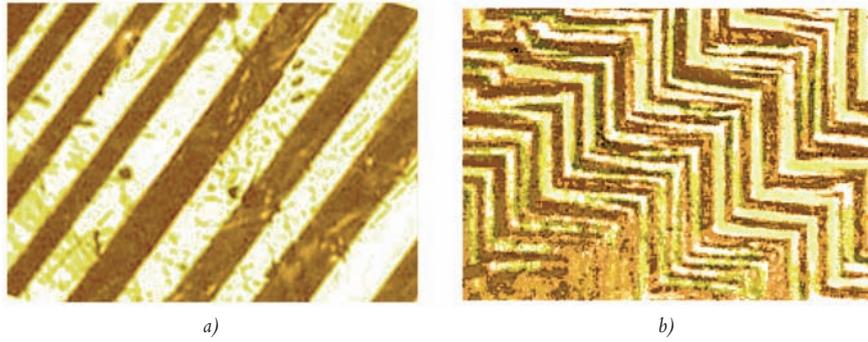


Figura 10. a) Imagen de microscopía óptica de una muestra de NiMnGa con dos variantes de martensita y b) imagen magneto-óptica que muestra los dominios magnéticos dispuestos a 90° en cada variante.³

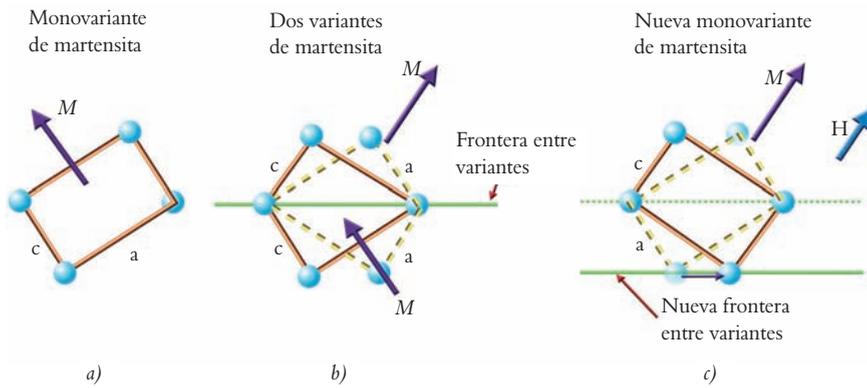


Figura 11. Mecanismo de desplazamiento de la frontera de macla entre dos variantes. En c) el átomo en la parte inferior de la frontera original de macla se mueve a su nueva posición, lo que genera en esta región la orientación cristalográfica de la variante de la parte superior de la figura y con ello el movimiento de la frontera de macla hacia abajo.⁵

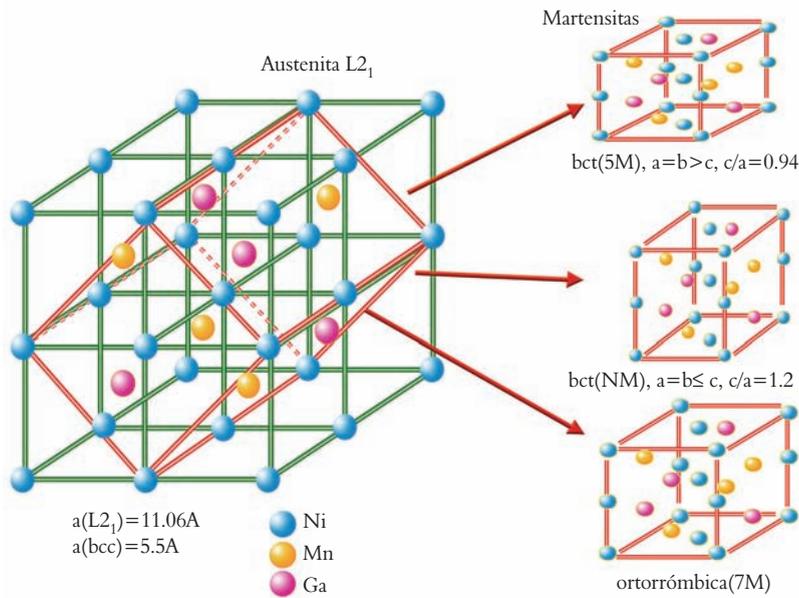


Figura 12. Los tres tipos de celdas unitarias de la martensita, obtenidas a partir de la celda unitaria de la austenita en aleaciones NiMnGa.

La deformación macroscópica máxima que puede alcanzarse está determinada por el cociente c/a , donde c y a son los parámetros de red de la estructura cristalográfica bct de la martensita. El valor porcentual de la deformación está dado por $(1-c/a) \times 100$ y es del orden de 10 por ciento, lo que corresponde precisamente con la deformación máxima alcanzable.

A partir de la estructura L21 (fcc) de la austenita se obtienen tres estructuras cristalográficas diferentes de la martensita (figura 12), dos de las cuales muestran modulaciones de cinco y siete planos atómicos (figura 13). Como ya dijimos, estas estructuras moduladas son las que presentan el efecto memoria de forma magnético y sólo se obtienen en aleaciones no estequiométricas. La formación de una u otra de estas estructuras depende de la composición de la aleación. Como puede deducirse de la figura 12, la deformación máxima para la estructura modulada 5M es 6 por ciento y para la 7M es 11 por ciento.

La figura 14 muestra una curva del porcentaje de deformación en función del campo magnético externo, para una aleación 5M. Es importante notar que una vez aplicado el campo magnético y deformada la aleación, el efecto no es reversible, es decir que si ahora suprimimos el campo la aleación permanecerá deformada. Para recuperar la forma original es necesario aplicar un campo magnético perpendicular al anterior o bien un esfuerzo externo en la dirección adecuada. En

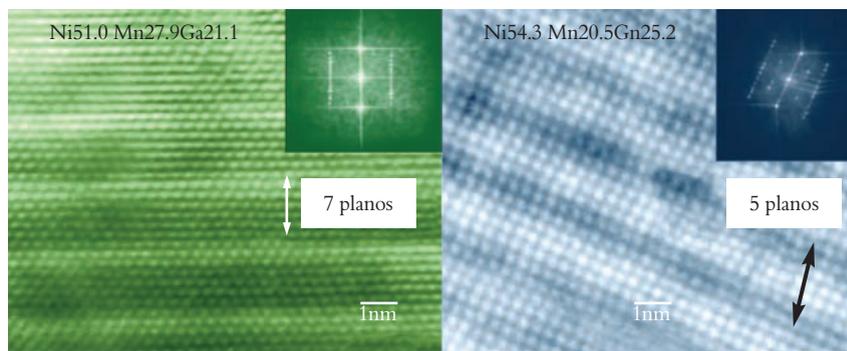


Figura 13. Imágenes de microscopía electrónica de transmisión de aleaciones NiMnGa. La elevada amplificación utilizada permite distinguir claramente las modulaciones cada siete y cinco planos atómicos respectivamente.⁶

ambos casos se provocará el crecimiento de la segunda variante, con lo cual la aleación recuperará su forma original. Al aplicar el campo magnético de manera alternada en esas dos direcciones se podrá obtener el efecto memoria de forma.

más opciones en diversos sectores industriales, como el automotriz, el de aparatos domésticos y el de sistemas de seguridad, entre otros. Una de las ventajas de estos sistemas radica en la posibilidad de obtener el efecto con ciclos más rápidos que en el caso de

Algunos dispositivos actuadores se comercializan en la industria automotriz y en sistemas de seguridad

Actualmente ya se comercializan algunas aplicaciones con dispositivos actuadores, aunque se espera generar

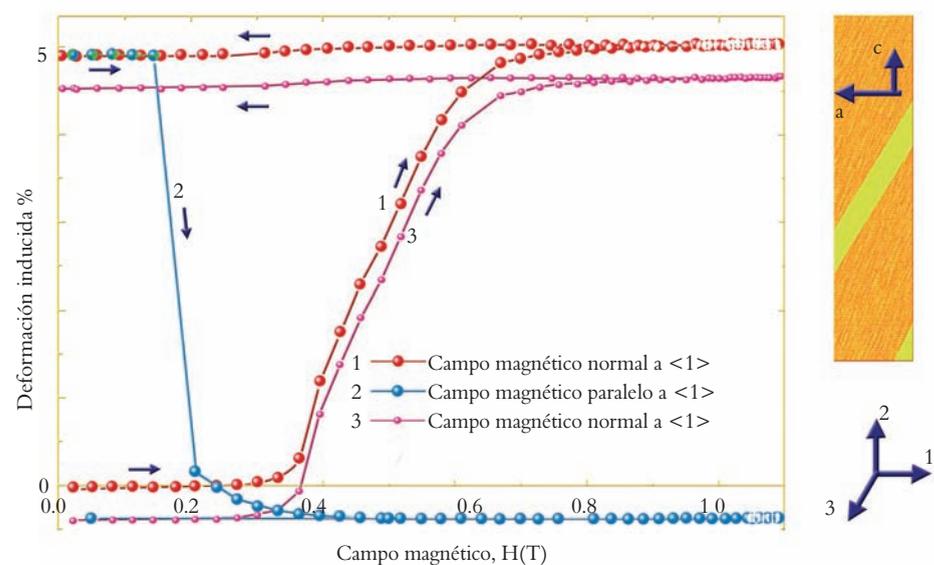
las aleaciones convencionales con memoria de forma. En efecto, en las aleaciones magnéticas la recuperación de la

forma puede producirse a frecuencias de cientos de hertz (ciclos por segundo), lo que abre un importante espectro de aplicaciones que seguramente veremos —y disfrutaremos— en el futuro próximo. ■

Bibliografía

- ¹ L. Fuentes Cobás, B. Jiménez y D. Ríos Jara, “El problema de la textura en ferroeléctricos de aurivillius”, *Boletín de la Sociedad Española de Cerámica y Vidrio*, **38(5)** (1999), 394-401.
- ² R.C. O’Handley, K. Ullakko, J.K. Huang y C. Kantner, “Large magnetic-field-induced strins in Ni-Mn-Ga single crystal”, *Appl. Phys. Lett.*, **69** (1996). 1966.
- ³ N. Glavatska, “Crystal Structure and Twinning in Magnetic Shape Memory Alloys”, Symposium 16, Congreso Internacional de Investigación en Materiales, Cancún, Mexico, 2004.
- ⁴ J. Enkovaara *et al.*, “Magnetically driven shape memory alloys”, en *A Materials Science and Engineering*, vol. 378, 2004, pp. 52-60
- ⁵ J. Feuchwanger, Symposium 16, Congreso Internacional de Investigación en Materiales, Cancún, México, 2004.
- ⁶ J. Pons, R. Santamarta, V.A. Chernenko y E. Cesari, *Materials Chemistry and Physics*, 2003.

Figura 14. Porcentaje de deformación vs campo magnético³ para una aleación NiMnGa con estructura martensítica modulada 5M, formada inicialmente por dos variantes de orientación (amarilla y naranja). La curva 1 corresponde a la aplicación del campo en la dirección $\langle 2 \rangle$ paralela a la dirección del parámetro c de la variante color naranja en la figura. Una vez deformado, el cristal permanece así al suprimirse el campo magnético. Para recuperar la forma original, el campo debe aplicarse en una dirección perpendicular a c (dirección $\langle 1 \rangle$ en la figura), como lo muestra la curva 2, lo que induce nuevamente la formación de la variante amarilla y la recuperación de la deformación al estado original. La curva 3 corresponde a un nuevo ciclo.



Los polímeros π -conjugados: veinte años de investigación y avances en optoelectrónica

Ernesto Rivera,* Raúl F. Flores y Gerardo Terán, Instituto de Investigaciones en Materiales, UNAM.

Introducción

Los polímeros fueron considerados durante años como materiales aislantes o plásticos; no obstante, este concepto cambió con la aparición de ciertos polímeros que poseen una buena conductividad eléctrica. Algunos polímeros, como el poli(N-vinilcarbazol) (PVK) son fotoconductores, es decir, conducen débilmente la electricidad bajo la influencia de la luz y se utilizan en la industria de la electrografía. A principios de los años setenta del siglo pasado, se descubrió que ciertos polímeros como el poli(nitruro de azufre) (PNS) y el poliacetileno (PA) se vuelven altamente conductores en presencia de ciertos aditivos o dopantes (figura 1).¹⁻³

Este descubrimiento desató una serie de investigaciones para dilucidar el mecanismo de conducción y aplicarlo a la

construcción de baterías ligeras. Aunque la comprensión del mecanismo de conducción sigue siendo elusiva, se observó que ciertas características estructurales de los polímeros están fuertemente ligadas a la conductividad.¹⁻³

Deslocalización. Un sistema π -conjugado extendido siempre es necesario para favorecer la conductividad a lo largo de una cadena polimérica. En algunos casos, la carga puede transferirse a través de los apilamientos de sustituyentes aromáticos que penden de la cadena principal, como en el caso del PVK.

Dopado. Los agentes dopantes son aditivos que pueden ser aceptores de electrones, como el AsF_5 o los halógenos, o bien donadores de electrones como los metales alcalinos. La conductividad varía con la concentración de éstos. El dopado también puede traer consigo un rearrreglo de los dobles enlaces en



Soma. María José de la Macorra, 2000. Metal y guantes (85 x 62 x 3 cm). Detalle.

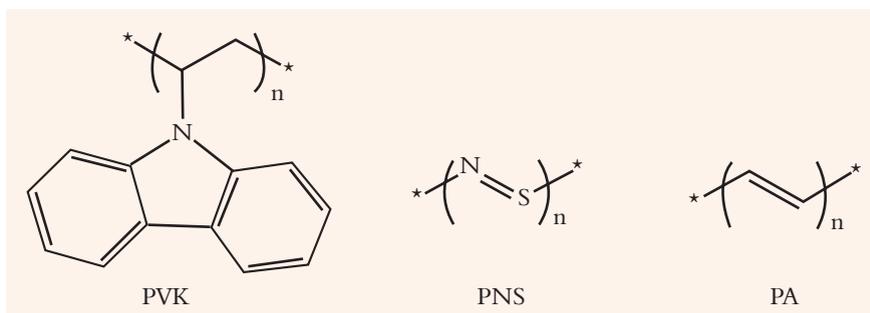


Figura 1. Primeros polímeros conductores conocidos.

polímeros no conjugados para generar un sistema conductor conjugado.

Morfología. La conductividad está influida por factores conformacionales y configuracionales (el sistema conjugado debe adoptar la planaridad, es decir enlaces sencillos y dobles deben encontrarse en un mismo plano), así como por la cristalinidad.

pueden sintetizarse bajo la forma de películas continuas a partir de una solución de monómero mediante electropolimerización.⁵

La conductividad (σ) se expresa en siemens por centímetro (S/cm). Si clasificamos los materiales de acuerdo con su conductividad, podemos considerarlos como aislantes cuando poseen una



Whalebone Alley, 2000. María José de la Macorra, 2000. Metal, hule y guante (200 x 44 x 9 cm).

Algunos polímeros presentan buena conductividad eléctrica, otros son fotoconductores y se usan en electrografía

Los polímeros π -conjugados son aislantes o semiconductores en el estado neutro, pero se vuelven altamente conductores después de ser dopados. Entre estos polímeros, el poliacetileno⁴ figura como el más conjugado y el mejor conductor; sin embargo, su insolubilidad, su inestabilidad en el aire y su infusibilidad complican su procesamiento e impiden su utilización como material funcional, por eso se estudiaron y desarrollaron otros polímeros conductores, como la polianilina (PAn), el polipirrol (PPy), el politiofeno (PT), el poli (*p*-fenileno) (PP), el poli (fenilvinileno) (PPV), el poli (fenilacetileno) (PFA) y algunos derivados de éstos de los que hablaremos más adelante (figura 2).

El dopado es necesario para elevar la conductividad de estos polímeros a niveles prácticos. Entre los dopantes típicos frecuentemente utilizados se encuentran el AsF_5 y el I_2 , los cuales se reducen respectivamente a AsF_6^- y I_3^- . Ciertos polímeros conductores también

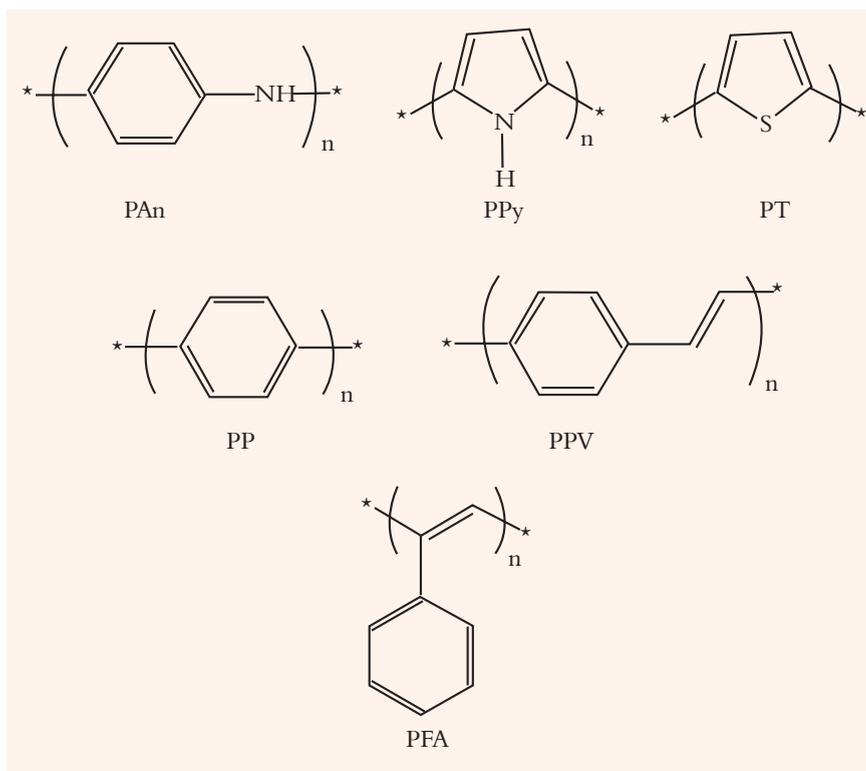


Figura 2. Polímeros π -conjugados más representativos.

conductividad $\sigma < 10^{-8}$ S/cm, semiconductores cuando $10^{-7} \leq \sigma \leq 10^{-1}$ S/cm y buenos conductores cuando $\sigma > 10^2$ S/cm. Algunos polímeros π -conjugados en el estado dopado muestran conductividades cercanas a las de los metales (tabla 1).³

transistores, diodos electroluminescentes, láseres, fotorresistencias conductoras, celdas fotovoltaicas, etcétera.⁷⁻⁸

La importancia de los polímeros conductores fue galardonada en el año 2000 con la entrega del Premio Nobel de Química a tres científicos: H. Shira-

una solución mil veces más concentrada en catalizador y obtuvo una película fina de poliacetileno que se asemejaba a una hoja de papel aluminio en lugar del material con apariencia de polvo oscuro que esperaba.¹⁰ Durante una visita a la Universidad de Tokyo, McDiarmid, de la Universidad de Pennsylvania, se encontró con Shirakawa y lo invitó a Filadelfia para examinar en detalle esta nueva forma de poliacetileno. En colaboración con Heeger, los dos científicos descubrieron que mediante una oxidación o reducción parcial, conocida como una reacción de dopado, la conductividad del poliacetileno aumenta más de un billón de veces. Conductividades eléctricas hasta del orden de 10^5 pueden obtenerse con algunas formas de poliacetilenos.

Tabla 1. Conductividades de algunos metales y polímeros dopados

| Material | Conductividad (S/cm) |
|-------------------------|----------------------|
| Cobre | 5.8×10^5 |
| Oro | 4.1×10^5 |
| Poliacetileno | $10^3 - 10^5$ |
| Poli(nitruro de azufre) | $10^3 - 10^4$ |
| Poli(p-fenileno) | 10^3 |
| Poli(p-fenilenvinileno) | 10^3 |
| Polianilina | $10^2 - 10^3$ |
| Polipirrol | $10^2 - 10^3$ |
| Politiofeno | 10^2 |

Cabe señalar que los polímeros más estables no son necesariamente tan conductores como el poliacetileno, pero su conductividad es aceptable para aplicaciones comerciales. Además, la densidad de estos polímeros, alrededor de 1 g/cm^3 , es más baja que la de los metales (8.92 g/cm^3 para el Cu y 19.3 g/cm^3 para el Au) que constituyen una alternativa de primera elección para aplicaciones que requieren materiales optoelectrónicos ligeros.⁶

Los polímeros sintéticos han estado presentes en muchos aspectos de nuestras vidas, particularmente en el campo de la electrónica, estos materiales se usaron al principio únicamente como embalajes, aislantes eléctricos y fotorresistencias; no obstante, con el descubrimiento de los polímeros dopados conductores en 1977 surgieron nuevas aplicaciones. Después de más de veinte años de investigación, se descubrió que dichos materiales pueden ser usados ahora en películas antiestáticas transparentes, escudos electromagnéticos, electrodos modificados, ventanas electrocrómicas, supercapacitores, biosensores,

kawa, A.G. McDiarmid y A.J. Heeger, quienes fueron pioneros en este nuevo campo de estudio en la ciencia de los materiales.⁹ Como sucede con frecuencia en ciencias, el descubrimiento de los polímeros conductores comenzó con un error de laboratorio que produjo resultados inesperados: un estudiante del

El poliacetileno

Es el polímero conductor más conocido cuya forma dopada presenta una conductividad metálica a pesar de sus limitaciones. El poliacetileno no dopado posee una conductividad intrínseca de 1.7×10^{-9} S/cm para el isómero *cis*, y 4.4×10^{-5} S/cm (ligeramente semiconductor) para el isómero *trans* (figura 3).⁴ El dopado aumenta la conductividad del poliacetileno de forma dramática a un nivel comparable con el de los metales. Aparentemente, el dopado convier-

La conductividad del poliacetileno aumenta más de un billón de veces gracias al dopado

grupo de Shirakawa trabajaba en la polimerización Ziegler-Natta (Premio Nobel de Química en 1963) del acetileno; accidentalmente, el estudiante preparó

te el isómero *cis* rojo metálico en el isómero *trans* azul metálico. El agente dopante forma un complejo de transferencia de carga con el polímero, lo que

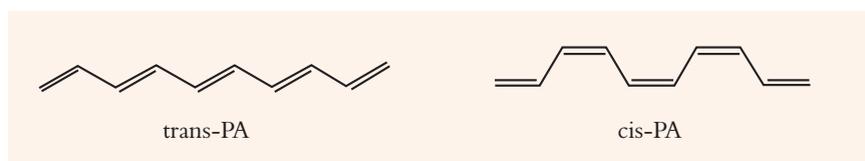
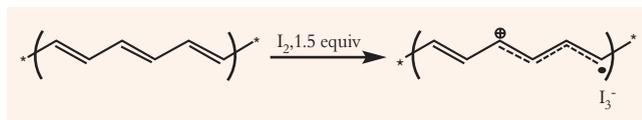


Figura 3. Geometrías posibles para el poliacetileno.

Figura 4. Dopado oxidativo del poliacetileno.



origina radicales-cation con un dopaje oxidativo, o radicales-anión con un dopaje reductivo, altamente deslocalizados (figura 4).

De acuerdo con una de las teorías relativas a la conductividad del poliacetileno, las regiones deslocalizadas, llamadas solitones, se extienden sobre aproximadamente 15 longitudes de enlace (figura 5). Más allá de este grado de conjugación, el aumento de energía causado por la elongación de los dobles enlaces y el encogimiento de los enlaces simples es más importante que la estabilización energética que proviene de la deslocalización

cuando las películas de polímero están orientadas de forma adecuada.¹¹

El poliacetileno predominantemente *trans* puede sintetizarse por medio de una reacción de metátesis a partir del 1,3,5,7-ciclooctatetraeno por apertura de ciclo (figura 6).³ El poliacetileno *cis* puede sintetizarse mediante el método Durham.³ Esta ruta implica la síntesis de un polímero precursor estable, que puede ser purificado y convertido térmicamente en poliacetileno *cis* por medio de una reacción de retro Diels-Alder. Un ejemplo usando un monómero tricíclico se ilustra en la figura 7. La po-

los poliacetilenos que contienen grupos apropiados, tales como los poli(arilacetilenos),¹²⁻¹⁴ son más estables y se procesan más fácilmente que sus homólogos no sustituidos; no obstante, exhiben también otras propiedades que no se observan en el poliacetileno. Hasta ahora se han sintetizado varios poliacetilenos sustituidos, de los cuales algunos son estables en el aire y solubles en disolventes orgánicos. Entre los poli(arilacetilenos) el más estudiado es sin duda el poli(fenilacetileno) (PFA) (figura 2).

Polímeros π -conjugados procesables

Dadas las limitaciones del poliacetileno, los químicos se dieron a la tarea de preparar otros polímeros aromáticos más estables. El desarrollo de la técnica de electropolimerización para producir pe-

El desarrollo de la técnica de electropolimerización para producir películas de polímero conductoras abrió nuevos caminos en la investigación en materiales

adicional. La conducción involucra un movimiento de electrones intramolecular e intermolecular vía los solitones po-

limerización se efectúa gracias a una reacción de metátesis para dar un polímero precursor. La degradación térmica

lículas de polímero conductoras abrió nuevos caminos en este novedoso campo de investigación. A principios de la

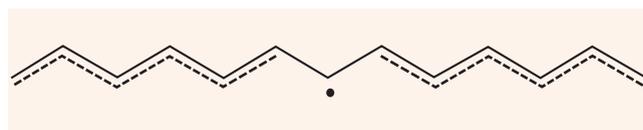


Figura 5. Estructura de un solitón.

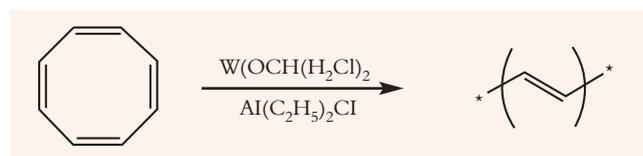


Figura 6. Síntesis de poliacetileno mediante una reacción de metátesis.

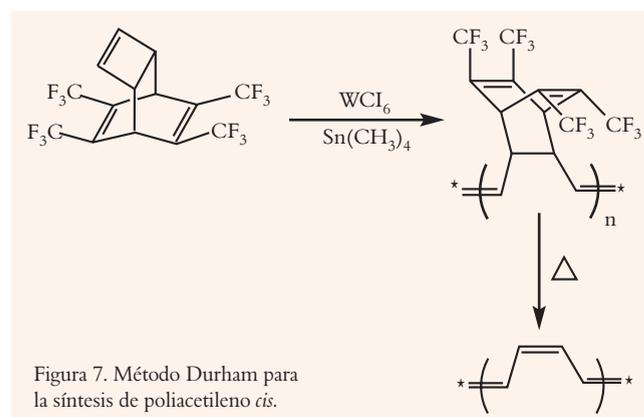


Figura 7. Método Durham para la síntesis de poliacetileno *cis*.

sitivos o negativos. La conducción intermolecular depende en gran medida de la cristalinidad. Esto cuenta mucho para el aumento de la conductividad en el poliacetileno (hasta 1.5×10^5 S/cm)

de las películas de este último genera películas coherentes de poliacetileno *cis*.

En las últimas décadas, la síntesis de acetilenos sustituidos ha atraído mucho la atención sobre los poliméricos, ya que

década de los ochenta del siglo pasado, muchos estudios se consagraron al polipirrol electropolimerizado, politiofeno y polianilina, aunque el objetivo último era el desarrollo de nuevos materiales



Sin título. María José de la Macorra, 2000. Porcelana.

poliméricos que combinaran las propiedades electrónicas de los metales y semiconductores y su facilidad de procesamiento con las propiedades mecánicas de los polímeros tradicionales. Para este propósito se preparó una nueva serie de polímeros π -conjugados sustituidos, ya que los no sustituidos son insolubles, infusibles, rígidos y tienden a crear fuertes interacciones intermoleculares (agregación).

Los primeros experimentos se llevaron a cabo en poliacetilenos sustituidos y pirroles N-sustituidos, pero la presencia de sustituyentes voluminosos provocó una torsión en la cadena principal, lo que condujo a la obtención de materiales procesables con un grado de conjugación muy pobre y con propiedades eléctricas muy limitadas.

El mayor adelanto ocurrió a mediados de los ochenta con la síntesis de poli(3-alkiltiofeno)s altamente conductores y procesables.¹⁵ En el estado sólido, una conformación anticoplanar y altamente conjugada de la cadena principal de politiofeno puede albergar un sustituyente alquilo en cada unidad repetitiva. La solubilidad no sólo fue importante para el procesamiento sino que permitió una mejor caracterización estructural y física de estos materiales. Algunos años después se descubrió que

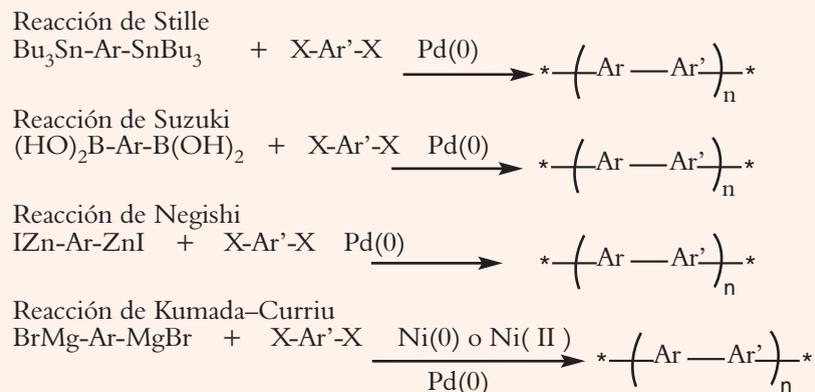
la utilización de contraiones relativamente grandes (que son necesarios para mantener la neutralidad eléctrica) permite producir polianilinas conductoras procesables en solución. Curiosamente las polianilinas pueden sufrir una transición aislante-conductor por simple protonación, lo que se conoce como proceso de dopado ácido.

Varios estudios en síntesis y caracterización de polímeros conductores procesables demostraron que la síntesis de polímeros π -conjugados bien definidos (idealmente sin defectos) podía mejorar de manera significativa su eficiencia. Así, en diversos intentos para desarrollar procesos sintéticos más viables para di-

chos materiales electrónicos se empleó una gran variedad de acoplamientos aromáticos: Grignard, Stille, Suzuki, Negishi, Kumada-Curriu entre otros, que permitieron avances significativos en este campo de estudio (figura 8). Esto llevó al descubrimiento de estructuras conjugadas nuevas e interesantes como (>98% cabeza-cola poli(3-alkiltiofenos), poli(2,5-dialquil-1,4-fenilenos), poli(2,5-dialquil-p-fenilenvinileno)s, poli(9,9-dialquilfluoreno)s y más recientemente poli(n-alkil-2,7-carbazole)s (figura 9). Al usar una combinación de estos monómeros pueden sintetizarse numerosos copolímeros alternados y al azar. En los años noventa se descubrió que la utilización de oligómeros bien definidos y monodispersos poseen mejores propiedades que las observadas con materiales polidispersos de alto peso molecular para algunas aplicaciones.

Transistores orgánicos y diodos electroluminiscentes

Los últimos diez años han sido testigos del uso de polímeros y oligómeros conjugados (no dopados son semiconductores) como transistores orgánicos.¹⁶ Por ejemplo, en un transistor de efecto de campo *field-effect transistor* (FET), el voltaje aplicado al electrodo de salida determina la conductividad de un canal semiconductor que conecta otros dos electrodos. Aunque los polímeros y oligómeros conjugados semiconductores todavía no son apropiados para reem-

Figura 8. Acoplamientos aromáticos utilizados en la síntesis de polímeros π -conjugados.

plazar al silicio en microelectrónica de alta velocidad, son muy prometedores para microelectrónicos baratos de alto volumen tales como etiquetas de identificación y tarjetas inteligentes. Se fabricó recientemente un circuito integrado funcional totalmente hecho de polímero que opera como generador de código programable de 15 bit y que contiene 326 transistores orgánicos. Ahora incluso es posible preparar ambos tipos de transistores n y p.

Otra aplicación de vanguardia de este tipo de polímeros es el desarrollo de diodos electroluminiscentes.¹⁶⁻¹⁷ Una importante fuerza motriz para este campo de estudio es el sueño de construir pantallas flexibles y ultradelgadas para computadoras y televisiones. La estructura básica de un diodo luminiscente (figura 10) a base de polímero consiste de un electrodo inyector de huecos o cargas positivas (por lo regular transparente para ver la luz emitida a través de él) con una alta función de trabajo In-SnO₂ (ITO) o un polímero conductor, un electrodo inyector de electrones o cargas negativas con una baja función de trabajo Al, In, Mg o Ca y la película de polímero emisor de luz dispuesta entre estos dos electrodos. En esta estructura a base de capas, los huecos y los electrones inyectados migran a través de la capa de polímero y se combinan para formar excitones, los cuales se desactivan con la emisión de un fotón. Dependiendo de la

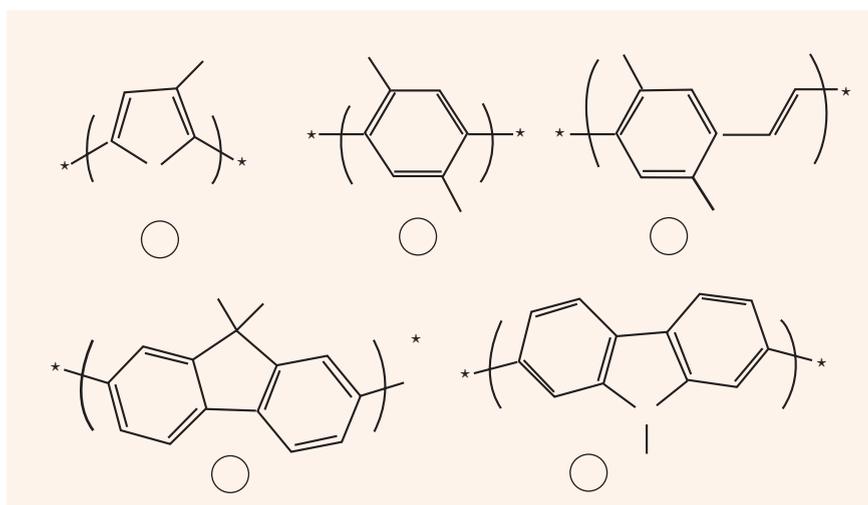


Figura 9. Algunos nuevos polímeros π -conjugados procesables.

estructura química del polímero emisor pueden obtenerse diferentes colores.

Ahora es posible fabricar arreglos de diodos electroluminiscentes multicolores que tienen una brillantez de 100

el problema de la estabilidad permanece en ciertos casos, como el de emisores azules, y debe ser resuelto para una utilización industrial a mayor escala de estos nuevos dispositivos optoelectrónicos.

Los diodos luminiscentes servirán para hacer pantallas flexibles y ultradelgadas para televisores y computadoras

cd/m² (la brillantez de una pantalla de televisión) con un voltaje de encendido de sólo unos cuantos volts. Sin embargo,

Sensores ópticos y electroquímicos

Finalmente, los sensores ópticos y eléctricos son ahora otro tópico importante de investigación en polímeros π -conjugados y electroactivos. Por ejemplo, algunos polímeros π -conjugados neutros pueden producir cambios de color repentinos al exponerlos a varios estímulos externos.¹⁸ Estos cambios ópticos están relacionados con una transición en la conformación de la cadena polimérica de una forma plana a una no plana, activada gracias a la funcionalización adecuada de cadenas laterales con respuesta a un campo (figura 11). Además de estas transiciones ópticas inducidas por calor (termocromismo), cambios de polaridad del disolvente (solvatocromismo), se generan nuevos fenómenos que incluyen la detección de iones (iono-

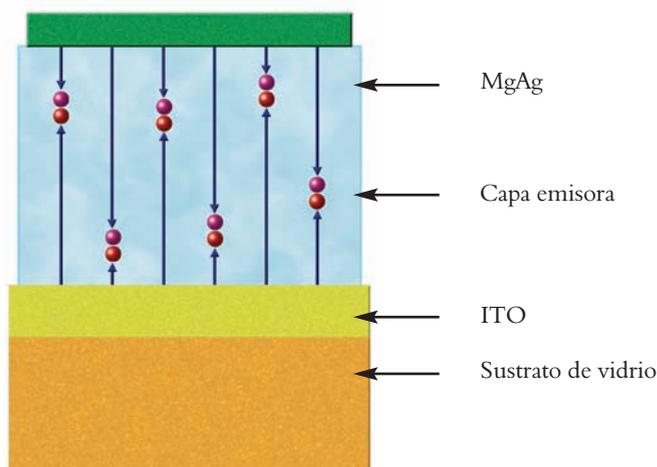
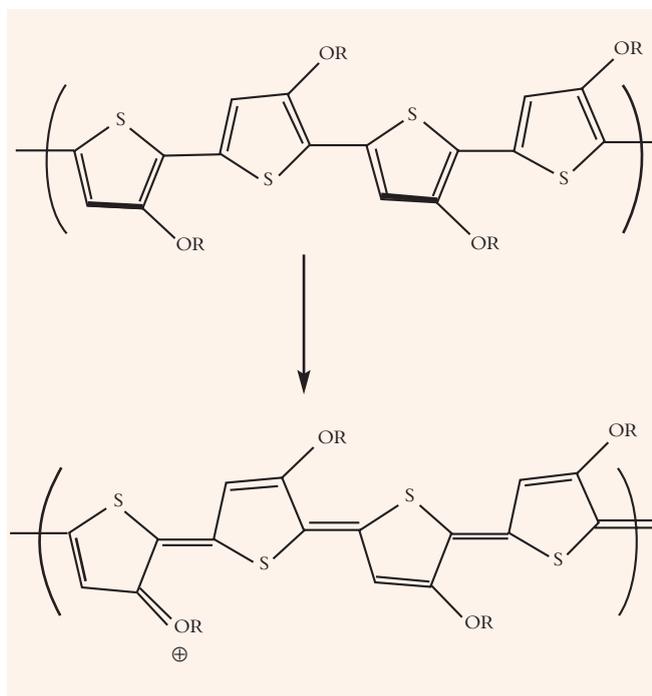


Figura 10. Estructura de un diodo electroluminiscente del tipo celda monocapa.



Figura 11. Cambios de conformación en un segmento de poliotieno.



Capullo. María José de la Macorra, 1999. Hierro forjado con cámara de llanta.

cromismo), la radiación UV (fotocromismo dual) y el reconocimiento molecular de entidades químicas o biológicas (afinitocromismo).¹⁸ Aparte del uso en detección colorimétrica, una modificación en la conformación del polímero conjugado puede cambiar también sus propiedades eléctricas y electroquímicas. Estas propiedades, altamente selectivas y eficientes, se aprovechan para el desarrollo de sensores electroquímicos. La estructura básica de un sensor se ilustra en la figura 12a; como puede apreciarse, éste consta de una cadena principal a base de un polímero π -conjugado, a la cual se encuentra enlazada una unidad de detección a través de un espaciador flexible. La unidad de detección es capaz de reconocer químicamente una entidad química específica; en ausencia de dicha entidad química, el polímero π -conjugado del sensor adopta una conformación casi plana debido a la ausencia de interacciones estéricas. No obstante, en presencia de la especie a reconocer, cada unidad de reconocimiento del sensor capta una molécula de la entidad química y forma un grupo más voluminoso. Para evitar efectos estéricos, estos grupos se alejan lo más posible

entre sí y ejercen una torsión en el sistema π -conjugado, ya que el espaciador flexible produce un efecto de palanca y logra así una forma torcida del sistema π -conjugado en el sensor (figura 12b), que presentará un menor grado de conjugación que se detecta debido a un cambio en la longitud de onda de absorción, en el potencial de oxidación o reducción, en el índice de refracción o en cualquiera otra propiedad y en algunos casos por un cambio de color a simple vista.

Conclusión

Con todos estos ejemplos es más que evidente que los polímeros conjugados son muy prometedores y siguen siendo una línea de investigación de vanguardia con gran futuro. Estos materiales dan la oportunidad de extender la utilidad de los polímeros a otras áreas que involucran propiedades ópticas y eléctricas, que antes habían sido consideradas totalmente ajenas a la ciencia de los polímeros. ■

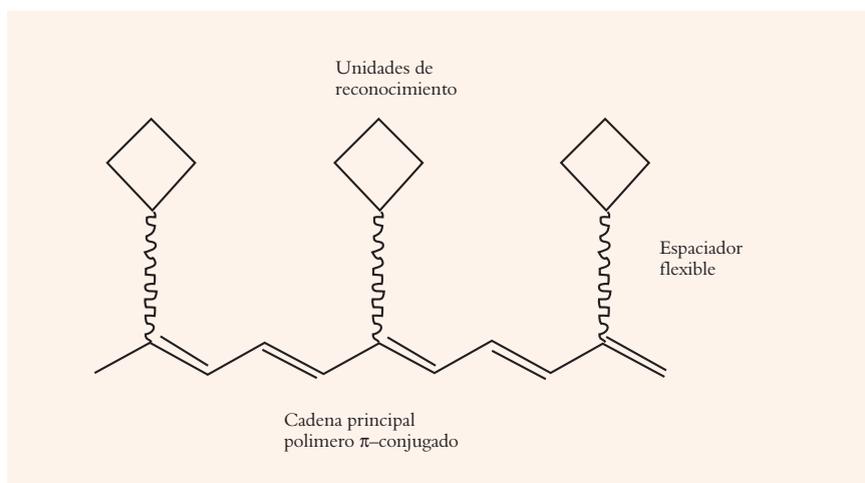


Figura 12. a) Estructura básica de un sensor a base de un polímero π -conjugado.

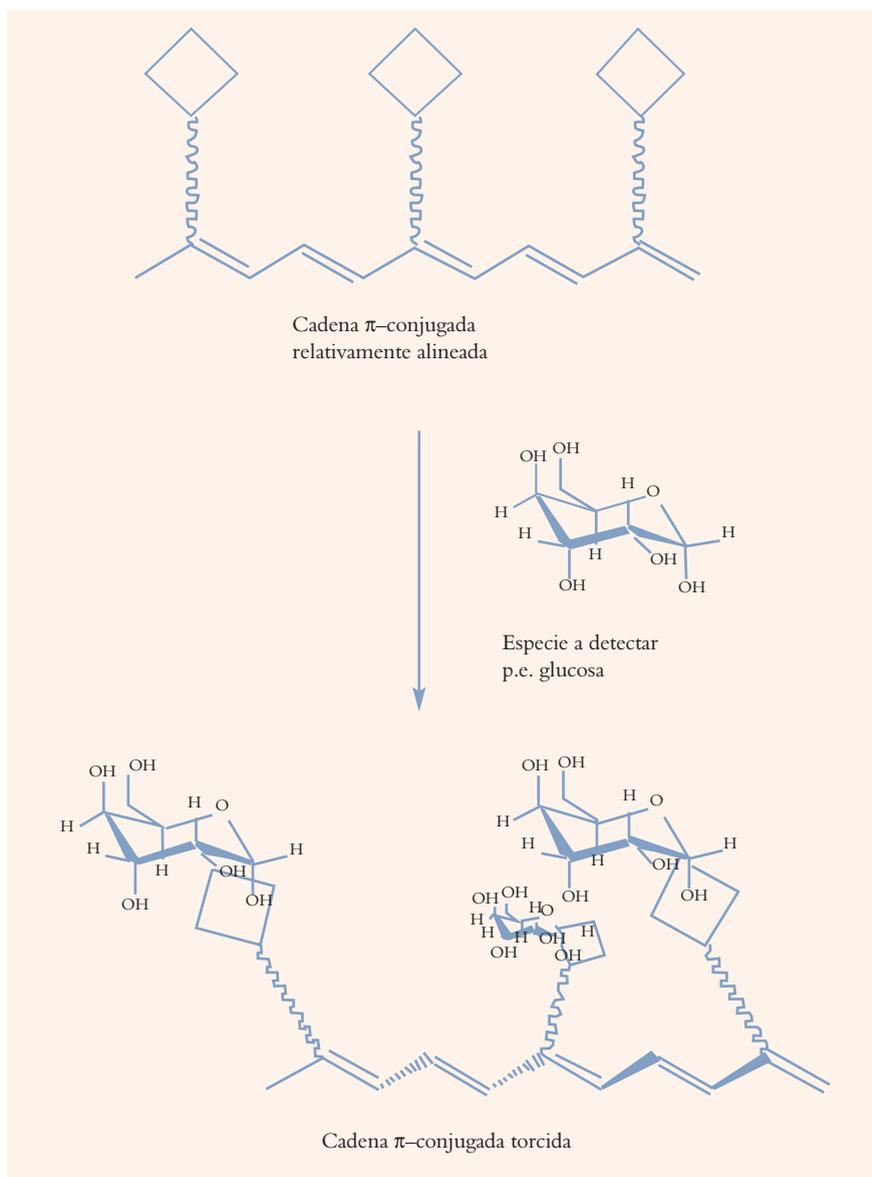


Figura 2. b) Detección de una especie química con un sensor apropiado.

Bibliografía

- ¹ T.A. Skoterm, *Handbook of Conducting Polymers*, vols. 1 y 2, Dekker, Nueva York, 1986.
- ² J.M. Margolis, *Conductive Polymers and Plastics*, Chapman and Hall, Nueva York, 1989.
- ³ M.P. Stevens, *Polymer Chemistry. An Introduction*, Oxford University Press, Nueva York, 1999.
- ⁴ J.W.C. Chien, *Polyacetylene*, Academic Press, Nueva York, 1984.
- ⁵ N. Toshima, S. Hara, "Direct Synthesis of Conducting Polymers from Simple

Monomers", *Prog. Polym. Sci.*, **20** (1995) 155.

⁶ J.M. Tour, "Conjugated Macromolecules of Precise Length and Constitution. Organic Synthesis for the Construction of Nanoarchitectures", *Chem. Rev.*, **96** (1996) 537.

⁷ T. Skotheim, J.R. Reynolds, R.L. Elsenbaumer (coords.), *Handbook of Conducting Polymers*, 2 ed., Marcel Dekker, Nueva York, 1998.

⁸ P. Bernier, S. Lefrant, G. Bidan (coords.), *Advances in Synthetic Metals: Twenty years of Progress in Science and*

Technology, Elsevier, Lausana, 1999.

⁹ H. Shirakawa, "The Discovery of Polyacetylene Film: The Dawning of an Era of Conducting Polymers (Nobel Lecture)", *Angew. Chem. Int. Ed.*, **40** (2001) 2574.

¹⁰ A.G. MacDiarmid, "Synthetic Metals: A Novel Role for Organic Polymers (Nobel Lecture)", *Angew. Chem. Int. Ed.*, **40** (2001) 2581.

¹¹ R.A. Pethrick, "Desk Reference of Functional Polymers: Syntheses and Applications", cap. 3, *Am. Chem. Soc.*, (1997).

¹² S.M.A. Karim, K. Musikabhuma, R. Nomura, T. Masuda, "Synthesis and Properties of Poly(9-phenanthrylacetylene) and Poly(1-pyrenylacetylene)", *Proc. Japan. Acad.*, **75** (1999) 97.

¹³ E. Rivera, M. Belletête, X.X. Zhu, G. Durocher, R. Giasson, "Novel Polyacetylenes Containing Pendant Aromatic Groups: Synthesis, Characterization, and Thermal and Optical Properties", *Polymer*, **43** (2002) 5059.

¹⁴ E. Rivera, "Study of the Influence of the Polyacetylene Main Chain Configuration and the Internal Stacking of Pendant Groups over the Optical and Photophysical Properties of *trans* and *cis*-Poly(pyrenylacetylene)s by UV-vis and Fluorescence Spectroscopy", *Rev. Soc. Quim. Mex.*, **48** (2004) 38.

¹⁵ A.F. Díaz, M.T. Nguyen, M. Leclerc, "Electronically Conducting Soluble Polymers", *Physical Electrochemistry*, I. Rubinstein (comp.), Marcel Dekker, Nueva York, 1995, p. 555-583.

¹⁶ A.J. Heeger, "Semiconducting and Metallic Polymers: The Fourth Generation of Polymeric Materials (Nobel Lecture)", *Angew. Chem. Int. Ed.*, **40** (2001) 2591.

¹⁷ J.H. Burroughes, D.D.C. Bradley, A.R. Brown, R.N. Marks, K. Mackay, R.H. Friend, P.L. Burns, A.B. Holmes, "Electroluminescence in Conjugated Polymers", *Nature*, **347** (1990) 539.

¹⁸ M. Leclerc, "Optical and Electrochemical Transducers Based on Functionalized Conjugated Polymers", *Adv. Mater.*, **11** (1999) 1491.

*riverage@zinalco.iimatercu.unam.mx

Supercómputo para la ciencia de los materiales: los clusters Beowulf

César Carlos Díaz Torrejón,* Centro Nacional de Supercómputo de los Centros Conacyt, Instituto Potosino de Investigación Científica y Tecnológica.

Introducción

Entender la naturaleza de los agregados atómicos —moléculas, cúmulos, sólidos extendidos, etcétera—significa conocer todas las interacciones que ocurren entre los elementos que los constituyen. Son las leyes de la mecánica cuántica (MC) las que describen el comportamiento de tales interacciones. La mecánica cuántica se basa en obtener soluciones a la ecuación de Schrödinger para un sistema en particular,

$$H\Psi = E\Psi$$

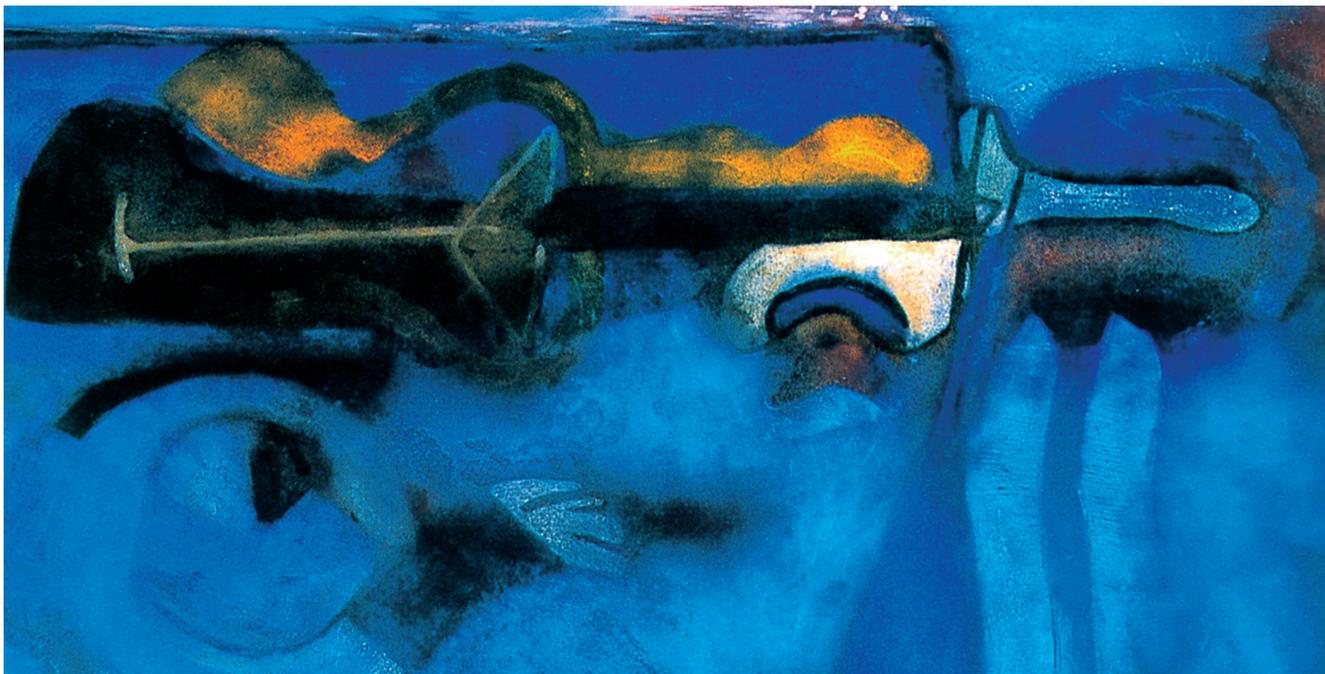
donde Ψ representa la función de onda,¹ E la energía total del sistema y H el operador hamiltoniano. La forma general del operador hamiltoniano para un sistema molecular está dada

como:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \sum_i \nabla_i^2 - \sum_i \sum_a \frac{Z_a e}{4\pi\epsilon_0 r_{ai}} + \sum_i \sum_{j>i} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{ij}} + \sum_a \sum_{b>a} \frac{Z_a Z_b e^2}{4\pi\epsilon_0 R_{ab}}$$

donde el primer término corresponde a la energía cinética de los electrones, el segundo describe la interacción de los electrones con los núcleos, el tercer término representa la interacción entre los electrones y finalmente el cuarto corresponde a la interacción entre los propios núcleos [1].

El planteamiento parece sencillo, pero resolver las ecuaciones, en general, no es tarea fácil.



Sumergiéndome, 1999. Pablo Amor. Óleo sobre tela (160 x 180 cm). Detalle.

Es sabido que en el formalismo de la mecánica cuántica el único problema de interacción entre átomos que puede resolverse de manera exacta, es decir dando una solución de forma analítica a la ecuación de Schrödinger para el sistema en cuestión, es la molécula de H_2^+ . En todos los demás casos la solución a la ecuación de Schrödinger se obtiene mediante algún procedimiento de aproximación numérica.

Estudiar sistemas diferentes de la molécula de H_2^+ , considerando en su estudio el mayor número de interacciones conocidas, se vuelve un problema difícil de abordar usando sólo el poder de cálculo de una o varias personas. En este contexto, las computadoras se convierten en un apoyo importante para el desarrollo de esta área de investigación científica, ya que con la ayuda de las computadoras y eficientes métodos cuánticos de cálculo se han incrementado el número y la complejidad de los sistemas atómicos a considerar para su estudio.

Hoy es posible realizar, en lapsos relativamente cortos, cálculos atómicos y moleculares con tal precisión que sirven incluso de guía para los experimentadores y en algunos casos tienen carácter predictivo.

En el periodo de 1910 a 1960, con la creación de la mecánica cuántica por Bohr, Heisenberg, Schrödinger, Dirac, Pauli y otros físicos brillantes, en un periodo muy corto (1925-1927), el desarrollo de métodos computacionales y técnicas experimentales, como la espectroscopia infrarroja, la resonancia magnética nuclear, de difracción, etcétera, se produjo un gran avance en la comprensión teórica y experimental de la química cuántica y la estructura molecular.² La unión de estos desarrollos con la naciente ciencia de la computación dieron origen a una nueva y prolifera área de investigación: la química computacional (QC).

El nacimiento de la moderna química computacional tiene sus orígenes en 1962 con el lanzamiento del Programa de Intercambio en Química Cuántica (QCPE por sus siglas en inglés). Este programa ayudó a los químicos a desa-

Suerte, 1999. Pablo Amor. Óleo sobre tela (65 x 80 cm). Detalle.



rollar, compartir y aplicar programas de cómputo basados en la mecánica cuántica para tratar de entender problemas fundamentales de los procesos químicos.

Con la llegada de las primeras mini-computadoras, en la década de los setenta, fue posible realizar los primeros estudios limitados de sistemas químicos reales. Convencidos del potencial que representaba la modelación de sistemas químicos, los científicos rápidamente desarrollaron métodos de simulación atomística que implementaban aproximaciones y avanzadas técnicas computacionales que permitían cálculos mucho

la modelación de estructuras proteínicas, críticas en la biología del ser humano. Uno de los códigos de cómputo pioneros en este tema se realizó en la Universidad de Harvard y se publicó en 1983 con el nombre de CHARMM [2]. Actualmente existen muchos códigos derivados de éste, que son esenciales en el área de modelación de las ciencias de la vida.

En este mismo periodo, el avance en el desarrollo de potentes sistemas de cómputo gráfico y su disponibilidad en el mercado permitieron el manejo interactivo en ambientes tridimensionales

Entre 1910 y 1960 se produjo un enorme avance en la comprensión de la mecánica cuántica

más rápidos de las propiedades de interés. Esto a su vez permitió el estudio de moléculas cada vez mayores, de su comportamiento dinámico e interacciones y, por lo tanto, la simulación del comportamiento de los sistemas moleculares.

En los inicios de la década de los ochenta, la química computacional había alcanzado un grado tal de avance que podía predecir la estructura y reactividad de algunas moléculas orgánicas pequeñas, en tanto que los métodos de simulación atomística podían aplicarse al estudio de sistemas de algunos cientos de átomos. Lo anterior abrió la posibilidad a

(3D) de sistemas moleculares cada vez más complejos. Entonces fue cuando la química computacional se mostró ante las compañías desarrolladoras de software y hardware como un serio prospecto comercial, situación que impulsó notablemente el desarrollo de esta área de investigación.

A finales de la década de los ochenta y principios de los años noventa, se empezó a extender la posibilidad de aplicación de las técnicas desarrolladas por la química computacional más allá de los sistemas orgánicos, con lo que se abrió una nueva sección de aplicación en la

ciencia de los materiales (CM). Para esto se requirieron modelos que trataran con una diversidad química mayor y un amplio rango de tipos de sistemas. En el estudio real de problemas dentro de la ciencia de los materiales no es suficiente el esquema de sistemas moleculares aislados de la química computacional, por lo que fue necesario resolver el problema de cómo extrapolar las predicciones de

nipulables como para ser aplicados a sistemas atómicos muy grandes. Otra parte se debió simplemente al incremento del poder de los sistemas computacionales aunado al avance en el diseño y optimización de los algoritmos empleados. El ejemplo más representativo de esta etapa es el programa CASTEP [3] desarrollado por investigadores de la Universidad de Cambridge y sus cola-

modelaciones enfocadas a la ciencia de los materiales, o de cualquier otro tipo, no siempre es posible, máxime que en general los tiempos que se requieren suelen ser muy grandes (de algunos cientos de horas para una simulación completa). Contar con un verdadero equipo de supercómputo significa inversiones que van desde unos cuantos cientos de miles a varios millones de dólares, situación difícil de resolver, sobre todo en los países en vías de desarrollo.

En fechas recientes se trabaja en un nuevo esquema para proveer de poder de cómputo de alto rendimiento, con costos relativamente bajos, mediante el empleo de los llamados clusters; en esencia se trata de construir una supercomputadora partiendo del ensamblaje de partes de cómputo de bajo costo, similares a las empleadas en los equipos de uso doméstico.

El resto de este artículo trata sobre este esquema de cómputo de alto rendimiento o supercómputo, tomando como base el desarrollo de los clusters Beowulf.

Antecedentes

El concepto de cluster Beowulf se refiere a un sistema de procesamiento numérico de tipo paralelo o distribuido, formado por computadoras independientes, interconectadas y que trabajan como un solo recurso de cómputo intensivo.

La esencia de un cluster Beowulf radica en la independencia de sus partes, es decir cada computadora que integra el cluster puede operar de manera individual, posee el hardware mínimo necesario y su propia imagen de sistema operativo. Con este esquema, la escalabilidad de un cluster Beowulf se presenta como ilimitada. Además, mayor poder de procesamiento no significa necesariamente un cambio completo de hardware,³ basta con añadir más computadoras a la estructura global del cluster.

Beowulf fue un héroe legendario del siglo VI, famoso por su valentía y por liberar a los habitantes del pueblo danés de Heorot de la opresión impuesta por el terrible monstruo Grendel, que

El desarrollo de la ciencia de los materiales se debe a que se aplicaron métodos de la mecánica cuántica

una pequeña unidad del material al sistema en bulto, es decir, en términos moleculares, ir de la confinación espacial al infinito.

En la ciencia de los materiales, los métodos de la mecánica cuántica adquirieron particular importancia debido a que muchas de las aproximaciones de la simulación atómica no son válidas para compuestos inorgánicos, metálicos u organometálicos, además de que muchas de las propiedades de interés, por ejemplo, las electrónicas, ópticas y magnéticas, están determinadas por su comportamiento cuántico.

El desarrollo de la ciencia de los materiales se derivó parcialmente de que, en este periodo, los métodos de la mecánica cuántica se hicieron lo bastante ma-

boradores. CASTEP establece la aplicación de métodos de primeros principios de la mecánica cuántica para el estudio de modelos de sólidos relativamente grandes.

Los requerimientos de poder de cómputo para las modelaciones en la ciencia de los materiales se han incrementado de forma importante, en parte debido a los tamaños de los sistemas que se quieren estudiar y en parte porque la calidad necesaria de los datos de la simulación es cada vez mayor.

En este escenario la ciencia de los materiales se convirtió en uno de los principales usuarios de los centros de supercómputo (SC) existentes. Tener acceso a tiempo de procesador en un centro de supercómputo para realizar



Recostada con bruma,
1999. Pablo Amor.
Óleo sobre tela
(75 x 180 cm).
Detalle.

sucumbió ante la poderosa espada del héroe. La figura 1 muestra la primera página del original del poema épico de Beowulf.

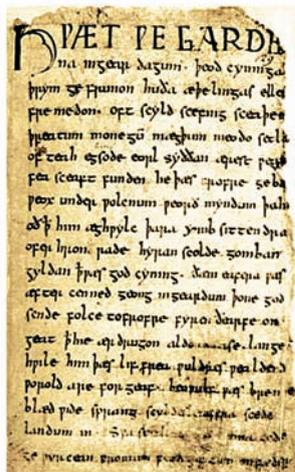


Figura 1. Página del manuscrito donde se narra el poema épico de Beowulf.

Como una metáfora, se dio el nombre de Beowulf a un nuevo esquema de cómputo de alto rendimiento, caracterizado por el uso de la tecnología de cómputo destinada al usuario doméstico (*hardware commodity*), campo hasta ese momento dominado por las supercomputadoras (*main frames*), sus opresivos costos y sus largos tiempos de cálculo.

Un cluster Beowulf consta básicamente de un conjunto de computadoras de bajo costo interconectadas entre sí a través de una tecnología de red de área local (LAN por sus siglas en inglés), que corren con un sistema operativo tipo UNIX (Linux de forma natural) de código abierto y ejecutan aplicaciones paralelas programadas con algún modelo estándar de envío de mensajes⁴ y bibliotecas matemáticas.

En 1993 la mayoría de las condiciones necesarias para el surgimiento del primer cluster de computadoras personales (PC) estaba dada: la aparición en el mercado del procesador Intel 80386, el mayor desarrollo de la compañía Intel desde su predecesor el 80286, el relativo bajo costo de las memorias de acceso aleatorio directo (DRAM por sus siglas en inglés) de estado sólido con capaci-

dades de hasta 8 Mbytes en un solo módulo, discos duros con capacidad de algunos cientos de Mbytes, tarjetas de interconexión tipo Ethernet de 10 Mbps y concentradores de bajo costo, aunados al naciente sistema operativo Linux y la madurez del modelo de envío de mensajes Parallel Virtual Machine (PVM).

Como complemento había que resolver un problema real; la NASA, a través del Programa Federal de Cómputo de Alto Rendimiento y Comunicación (HPCC por sus siglas en inglés) y el Proyecto Científico Tierra y Espacio del Centro de Vuelos Espaciales Goddard, requería un equipo de cómputo capaz de almacenar, manipular y desplegar grandes conjuntos de datos, producto del procesamiento de aplicaciones que corrían en máquinas masivamente paralelas (MPPs). Lo anterior no debería exceder el equivalente del costo de una estación de trabajo científica de la época, del orden de cincuenta mil dólares, poseer una capacidad de almacenamiento de por lo menos 10 Gbytes y proveer un

llamado Wiglaf (figura 2) se puso en operación. Basado en dieciséis procesadores Intel 80486 de 66 MHz (que rápidamente fueron cambiados por unos de 100 MHz) y rendimiento teórico pico de 74 Mflops, mostró ser un importante rival para las MPPs de su época (tales como las Intel Paragon y la TMC CM-5 con costos muy superiores). En 1995 apareció el segundo cluster Beowulf, denominado Hrothgar, con dieciséis procesadores Intel Pentium y conexión tipo Fast Ethernet (100 Mbps), con rendimiento de 280 Mflops. Para finales de 1996 apareció la tercera generación de clusters Beowulf, Hyglac del Jet Propulsion Laboratory (JPL) y Loki de Los Alamos National Laboratory (LANL), basados en procesadores Intel Pentium Pro, con rendimientos sostenidos por encima de 1 Gflops, que se convirtieron en los ganadores del premio Gordon Bell en 1997 por su inmejorable relación costo–rendimiento. Hoy 304 de las 500 supercomputadoras más rápidas del mundo son clusters [4] con rendimien-

Un cluster Beowulf consta de un conjunto de computadoras de bajo costo interconectadas entre sí

amplio ancho de banda de comunicación hacia la consola de despliegue. El requerimiento inicial era cercano a 1 Gflops⁵ de rendimiento teórico pico. En un análisis comercial de las soluciones existentes en el mercado de la época se pudo ver que había sistemas cuyos precios oscilaban entre diez y veinte veces el presupuestado. La solución: construir un equipo basado en componentes de cómputo destinados al mercado doméstico. Los estudios iniciales mostraban que con este esquema era posible cumplir con todos los requerimientos establecidos, excepto uno, el del rendimiento de 1 Gflops.

El proyecto Beowulf fue oficialmente inaugurado en el otoño de 1993. A finales de 1994, el primer sistema Beowulf,

tos superiores a 1.5 Tflops (1.5×10^{12} fops), en quinto lugar destaca el equipo del Centro Nacional de Supercómputo de Barcelona, con 4,800 procesadores y un rendimiento teórico pico de 42.1 Tflops.

Arquitectura de un cluster Beowulf

Un cluster Beowulf opera bajo el esquema “amo–esclavo”; es decir, el amo es el nodo de cómputo encargado de administrar y distribuir el trabajo a cada uno de los nodos esclavos a su mando, cuya única función es el procesamiento numérico de una aplicación en particular, de acuerdo con las instrucciones dadas por el nodo amo.

Existen tres componentes funda-

mentales a tener en cuenta durante la selección y construcción de un cluster procesador numérico, la cantidad y velocidad de la memoria de acceso aleatorio (RAM) y el tipo de interconexión entre los nodos del cluster, estos componentes definirán la capacidad de procesamiento numérico del cluster y el tipo idóneo de aplicaciones a procesar.

Procesadores

Existen tres familias principales de procesadores que se emplean en la construcción del cómputo de uso doméstico y que son la base de construcción de un cluster Beowulf. Los procesadores Intel



Figura 2. Wiglaf, construido a finales de 1994 en los laboratorios de la NASA; fue el primer sistema Beowulf de la historia, basado en dieciséis procesadores Intel 80486 de 66 MHz.

x86 (procesadores de 32 bits tales como el Pentium y XEON), x86_64 (de 64 bits como el XEON 64) y los Intel Itanium; los procesadores IBM/Motorola Power PC y la familia de procesadores AMD x86 (Athlons) y AMD x86_64 (AMD64, Opteron). En la tabla 1 se muestran los tipos principales de procesadores de cada una de las familias referidas, ya que son los más empleados en la construcción de los cluster Beowulf.

Existen tres familias principales de procesadores para construir clusters Beowulf

Las características a considerar en la selección del tipo de procesador son las siguientes:

Processor Clock Rate: Se refiere a la frecuencia en Mhz de la señal primaria en el procesador, la cual determina la relación en la que se procesan las instrucciones (operaciones).

Peak Floating Point Performance: Es una relación indicativa del número de operaciones que el procesador puede atender y procesar en un ciclo de reloj. Su

medida está dada en millones de operaciones en punto flotante por segundo (Mflops).

Cache Size: Se refiere a la capacidad en Kbytes de la memoria predictiva, que sirve de intermediario entre el procesador y la memoria principal (RAM). Esta memoria se considera como memoria de acceso ultrarrápido, lo que permite incrementar la velocidad del flujo de información al reducir la latencia que pre-

senta la memoria RAM. Los nuevos procesadores pueden presentar hasta tres niveles jerarquizados de memoria cache L1, L2 y L3 con capacidades distintas.

En la actualidad es posible conseguir procesadores de bajo costo con frecuencias de operación muy altas (rangos que van desde 1.8 GHz hasta 3.8 GHz), capaces de realizar dos, tres o cuatro operaciones de punto flotante por ciclo de reloj, lo que da como resultado procesadores con rendimientos teórico picos

Tabla 1. Algunos de los procesadores más empleados en la construcción de los clusters Beowulf

| Procesador | Arquitectura | Frecuencia | Cache | Bus frontal | Tecnología |
|------------------------------------------|--------------|---------------|-----------------------------------------|--------------------|-------------|
| Intel PIV ^{HT} | 32 bits | 2.80-3.80 GHz | L2 2MB | 800 MHz | 90 nm |
| Intel PIV ^{HT} Extreme Edition* | 32 bits | 3.20-3.73 GHz | L2 2MB | 800 y 1066 MHz | 90 nm |
| Intel XEON* | 32 bits | 1.40-3.20 GHz | L2 256 y 512 KB L3 512KB, 1,2 y 4 MB | 400 y 533 MHz | 90 nm |
| Intel XEON ⁶⁴ | 64 bits | 2.83-3.66 GHz | L2 1MB L3 4 y 8 MB | 667 MHz | 90 nm |
| Intel Itanium2 | 64 bits | 1.0-1.66 GHz | L1 32 KB L2 256 KB L3 1.5-9 MB | 400, 533 y 667 MHz | |
| AMD Athlon 64* | 32 y 64 bits | 1.80-2.40 GHz | L1 64 KB L2 256, 512 KB y 1 MB | 2000 MHz | 90 nm |
| AMD Opteron* | 32 y 64 bits | 1.80-2.80 GHz | L2 1MB | 1000 MHz | 90 y 130 nm |
| IBM-Motorola PowerPC 970 | 64 bits | 1.0 - 2.2 GHz | L2 512 KB | 300 MHz | 90 y 130 nm |

* Con opción de doble núcleo (*dual core*).

de las unidades a las decenas de Gflops manteniendo una buena relación costo-beneficio.

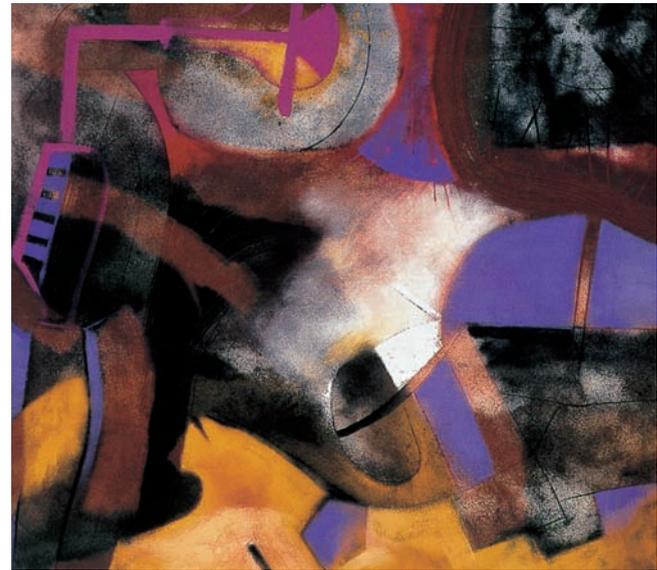
32 bits vs 64 bits

Para elegir entre utilizar una arquitectura de procesador de 32 bits o una de 64 bits se deben tener en cuenta dos factores: los requerimientos en memoria de las aplicaciones que se van a utilizar y el costo planeado en la construcción del cluster Beowulf.

Las arquitecturas de 32 bits tienen frecuencias de operación muy altas e incluso en algunos casos cuentan con opciones de tecnologías de hebras (*hyper-threading*) o, recientemente, tecnologías de doble núcleo por procesador (*dual core*), lo que garantiza grandes velocidades de procesamiento que en general compensan su desventaja en el número de operaciones que pueden realizar por ciclo de reloj (dos para procesadores tipo Intel PIV). Su principal desventaja es el límite de 4GB de memoria RAM a la que pueden tener acceso.

Las arquitecturas de 64 bits trabajan de manera holgada con aplicaciones que involucran el manejo de grandes conjuntos de datos, como video digital,

Mírame, 1999. Pablo Amor. Óleo sobre tela (180 x 200 cm). Detalle.



gramadas en un principio para arquitecturas de 32 bits por lo general requieren un proceso de migración, que en ocasiones implica la reescritura de código.

El análisis de rendimiento entre estas dos arquitecturas es otro factor importante a considerar en la selección; un ejemplo: tomemos dos procesadores de la compañía Intel: el Intel PIV de 32 bits con frecuencia de 3.2 GHz⁶ capaz

En este ejemplo se observa un rendimiento comparable, situación que no es igual cuando se comparan costos; en el momento de escribir este artículo, el precio de un procesador PIV como el mencionado oscilaba entre 210 y 270 dólares, mientras que un Itanium2 con las características señaladas costaba entre 1,500 y 4,000 dólares.

Este hecho generalmente rige la selección del procesador cuando se quiere construir un cluster Beowulf; sin embargo, recuerde que si sus aplicaciones requieren cantidades de memoria RAM superiores a 4 GB por procesador, su selección debe encaminarse a las arquitecturas de 64 bits.

Recientemente AMD introdujo en el mercado un procesador que combina el uso de 32 y 64 bits (AMD Opteron), con lo que se obtienen ganancias en velocidad de procesamiento y migración transparente de las aplicaciones de 32 a 64 bits; cuenta con frecuencias de hasta 2.6 GHz, dos operaciones de punto flotante, sin la limitante de los 4 GB de memoria RAM y con la opción de doble núcleo —todo esto a un precio que va de los 550 dólares con núcleo sencillo a los 2,200 dólares con doble núcleo—, el nuevo procesador se presenta como una excelente alternativa que preserva la mejor relación costo-beneficio deseable en un cluster Beowulf.

Las arquitecturas de 32 bits tienen frecuencias de operación muy altas y gran velocidad

cómputo científico y grandes bases de datos, el límite de memoria RAM a la que pueden acceder es de varios cientos de GB. Su desventaja principal es la frecuencia de operación baja, situación que compensan con un incremento en el número de operaciones de punto flotante que pueden realizar por ciclo de reloj (cuatro para un procesador tipo Intel Itanium2).

El empleo de las arquitecturas de 64 bits requiere que el sistema operativo sea extensivamente modificado para aprovechar las ventajas de las características de esta arquitectura. Las aplicaciones pro-

de realizar dos operaciones en punto flotante por ciclo de reloj y el Intel Itanium2 de 64 bits con frecuencia de operación de 1.5 GHz y capacidad de cuatro operaciones en punto flotante por ciclo de reloj.

El rendimiento teórico pico (Gflops) = [frecuencia de reloj del CPU (GHz)] · [número de operaciones de punto flotante por ciclo de reloj] · [número de CPUs].

Itanium2 = [1.5 GHz] * [4] = 6 Gflops
Pentium IV = [3.2 GHz] * [2] = 6.4 Gflops

Memoria principal

La cantidad y velocidad de la memoria de acceso aleatorio (RAM) es otro de los componentes cruciales a tomar en consideración en la construcción de un cluster Beowulf. Actualmente, al construir un cluster Beowulf se piensa en nodos que cuenten con cantidades de memoria RAM de por lo menos 1 GB por procesador, con la posibilidad de tener *motherboards* con capacidades de hasta 16 GB, lo cual permite que en un esquema de dos procesadores por *motherboard*, cada uno disponga de hasta 8 GB de RAM.

El tipo de memoria empleado hoy es el llamado DDR-SDRAM (Double Data Rate Synchronous Dynamic Random Access Memory), que opera en frecuencias que van de 100 MHz a 200 MHz, en transmisiones de 8 bytes por vez, con lo que se obtienen tasas de transferencia de datos⁶ que van desde 1,600 MB/s (para DDR de 100MHz) a 3,200 MB/s (para las de 200 MHz) entre el procesador y la memoria principal.

En la actualidad es posible construir clusters Beowulf con dos esquemas de uso de la memoria principal: el de memoria distribuida, en el que el total de memoria a la que un procesador tiene acceso es únicamente aquella que se encuentra físicamente instalada en su nodo y la memoria de los demás nodos es inaccesible; recientemente y debido sobre todo a los grandes anchos de banda que proveen las nuevas tecnologías de interconexión es posible emplear el esquema que se ha explotado en las supercomputadoras, el de memoria compartida (*sharememory*); es decir, el total de la



Sin alacrán, diablo, 2000. Pablo Amor. Óleo sobre tela (180 x 200 cm). Detalle.

memoria a que tiene acceso un procesador es la suma de las cantidades de memoria RAM de cada uno de los nodos. En general, la elección de usar uno u otro esquema depende del tipo de aplicación. En la práctica los nuevos clusters Beowulf combinan los dos esquemas de acceso a la memoria y cuentan con por lo menos dos procesadores por nodo (*o motherboard*) que hacen uso compartido, de manera local, de la memoria disponible en su *motherboard* y en conjunto dentro del cluster de memoria distribuida al no tener acceso a la memoria del resto de los nodos. Este hecho también debe tomarse en cuenta en los esquemas de programación paralela.

Interconexión

Un cluster Beowulf, al estar formado por nodos independientes, necesita contar con algún esquema de interconexión

entre ellos. Las características de supercómputo de un cluster Beowulf las da la interconexión, pues éste es el medio por el cual todos los nodos del cluster intercambian información entre sí, lo que permite el procesamiento de una aplicación de manera conjunta. Un costo importante del total presupuestado para la construcción de un cluster Beowulf es el hardware de interconexión, debido a que una buena conexión de red entre nodos garantiza un eficiente intercambio de datos entre ellos.

La selección del hardware de conectividad incluye equipo que provea del mayor ancho de banda posible, con la latencia más baja, es decir el canal más grande por el que fluirán los datos, con el tiempo más bajo de respuesta en el envío y/o recepción de la información.

Las tecnologías disponibles actualmente van desde las económicas, basa-

Tabla 2. Tecnología de conectividad empleada en la construcción de los clusters Beowulf.

| Compañía | Tecnología | Ancho de banda | Latencia (MPI) | Costo (dólares)* |
|-----------------------|-------------------|------------------|----------------|------------------|
| 3Com Fast Ethernet | UTP ¹ | 100 Mb/s | >100µs | 1,360.00 |
| 3Com Gigabit Ethernet | UTP | 1 Gb/s | 40µs | 4,960.00 |
| Myrinet | Fibra óptica | 10 Gb/s | 2µs | 21,720.00 |
| Quadrics | UTP; Fibra óptica | 7.2 – 115.2 Gb/s | 1.29µs | 30,852.00 |
| Infiniband | Fibra óptica | 20 – 60 Gb/s | 2.7µs | ND |

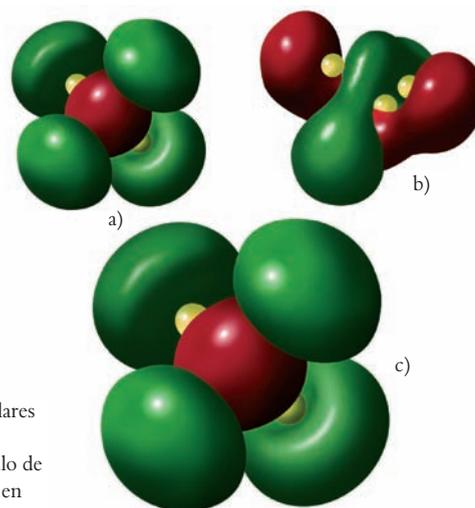
¹ Par trenzado de cobre.

* Los costos son aproximados y están basados en una configuración de 16 nodos; se incluye el costo de todos los componentes necesarios para la conexión. Precios tomados directamente de los sitios en Internet de los fabricantes

das en cables de par trenzado de cobre con hardware activo (tarjetas de red y switches) Fast Ethernet, con anchos de banda máximos entre 100 Mbytes/s y 1,000 Mbytes/s, hasta las tecnologías de conexión basadas en fibra óptica que proveen anchos de banda de decenas de Gbytes/s con latencias tan pequeñas como $2\mu\text{s}$. En la tabla 2 se muestra la comparación de las tecnologías de interconexión disponibles y sus costos aproximados.

En la elección del tipo de tecnología de interconexión, nuevamente el conocimiento previo de las aplicaciones que se van a utilizar en el cluster es un factor determinante, eso obedece a que algunas aplicaciones requieren intercambiar información entre los nodos durante todo el proceso de cálculo, mientras que otras distribuyen los procesos al inicio del cálculo y no necesitan información posterior hasta el final, cuando envían sus resultados al nodo colector. En el primer caso disponer del mayor ancho de banda posible con la latencia más baja es garantía de un cálculo rápido y eficiente, en tanto que en el otro caso la

Figura 3. a) y b) Los orbitales moleculares más bajos en energía sin ocupación (LUMO), en el estado base del cúmulo de Mg4. c) El orbital molecular más alto en energía con ocupación (HUMO).



latencia pasa a segundo término, ya que en esta situación es más importante contar con procesadores muy veloces. En resumen, la latencia baja cuesta y cuesta mucho (véase la tabla 2).

En fechas recientes y como herencia de la experiencia obtenida en la construcción de supercomputadoras, compañías como Cray y Silicon Graphics

ofrecen esquemas alternativos de interconexión directa entre procesadores (NUMALink para los equipos SGI Altix y Rapid Array Interconnect para los equipos Cray serie XD1) sin el empleo de switches intermediarios, con anchos de banda sostenidos superiores a 20 Gbytes/s y latencias de hasta $1.8\mu\text{s}$ (para RAI de Cray).

Tabla 3. Algunos de los códigos de modelación molecular más empleados en la ciencia de materiales

| Código | Paralelización | Métodos | Versión | Capacidad | Site |
|-----------------------|--------------------------------|------------------------------------------------------|---------|---------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------|
| ABINIT ^G | MPI | DFT-PlaneWave Seudopotenciales | 3.0 | Energía total Densidad de cargas Estructura electrónica | http://www.abinit.org/ |
| CASINO ^G | MPI | Quantum Montercarlo | 1.8.1 | Estructura electrónica | http://www.tcm.phy.cam.ac.uk/ |
| CASTEP ^C | Share Memory | DFT | ND | Propiedades de sólidos Interfaces Superficies | http://www.accelrys.com/ |
| CPMD ^G | MPI | DFT-PlaneWave | 3.9.2 | Dinámica molecular | http://www.cpmc.org/ |
| GAMESS ^G | Share Memory TCP/IP sockets | RHF, ROHF, URHF UVD, DFT, etc. RHF, URHF, DFT, | 2005 | Estructura electrónica | http://www.msg.ameslab.gov/ |
| Gaussian ^C | Linda | CCSD(T), MP2, MP3, MP4, CI, etc. | 03 | Estructura electrónica | http://www.gaussian.com/ |
| Jaguar ^C | Share Memory | DFT | 6.0 | Estructura electrónica | http://www.schrodinger.com/ |
| NWChem ^G | TCGMSG, MPI | RHF, UHF, ROHF, DFT, MP2, CCSD(T), CI, etc. | 4.7 | Estructura electrónica | http://www.emsl.pnl.gov/ |
| PWSCF ^G | MPI | DFT-PlaneWave | 2.1.5 | Estructura electrónica | http://www.pwscf.org/ |
| Siesta ^G | MPI | DFT Seudopotenciales | 1.3p | Estructura electrónica | http://www.uam.es/ |

^G Gratuito, previa firma de convenio de no usarse con fines comerciales.

^C Comercial, requiere licencia de uso.

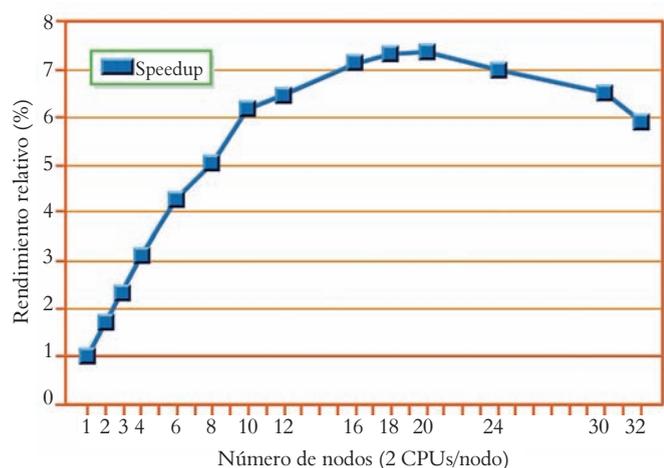


Figura 4. Gráfica de rendimiento relativo del código NWChem en un cálculo de prueba empleando el método de funcionales de la densidad (DFT).

Aplicaciones de los cluster Beowulf en la ciencia de los materiales

La ciencia de los materiales encontró en los clusters Beowulf una útil herramienta para sus crecientes necesidades de cómputo, situación que obligó a que cada vez sea mayor el número de códigos que son portados para clusters. La disminución en el costo de los equipos de cómputo y las ganancias debidas a la mejoría en los tiempos de procesamiento⁷ son algunas de las ventajas que se obtienen con el empleo de clusters. La

figura 3 muestra el resultado de una modelación de la estructura electrónica para el estado base en un cúmulo de Mg_4 [5].

En la tabla 3 aparece un resumen de algunos de los códigos de modelación molecular empleados hoy en las investigaciones en la ciencia de los materiales que han sido exportados a los ambientes de clusters.

Un hecho importantes que se debe señalar en el momento de realizar un cálculo en un cluster Beowulf es el grado de paralelización del código emplea-

do; ningún código de ningún tipo es cien por ciento paralelizable, esto significa que en ningún caso el tiempo de procesamiento se reducirá de forma lineal con el incremento de procesadores para el cálculo. En cada una de las aplicaciones empleadas en un cluster Beowulf existe un número óptimo de procesadores con los que se obtiene el máximo rendimiento posible.

En la figura 4 se muestra una prueba de rendimiento para el código NWChem [6]; en un cálculo de teoría de funcionales de la densidad (DFT) se observa el rendimiento relativo con el incremento de nodos, con el máximo de rendimiento en 20 nodos (40 procesadores) [7].

Conclusiones

Los clusters Beowulf revolucionaron el mundo del supercómputo y volvieron accesible el poder de cómputo. La ciencia de los materiales ha sido una de las áreas científicas que más se ha beneficiado con el esquema de clusters, ya que le permite estudiar agregados atómicos cada vez más grandes y de mayor complejidad.

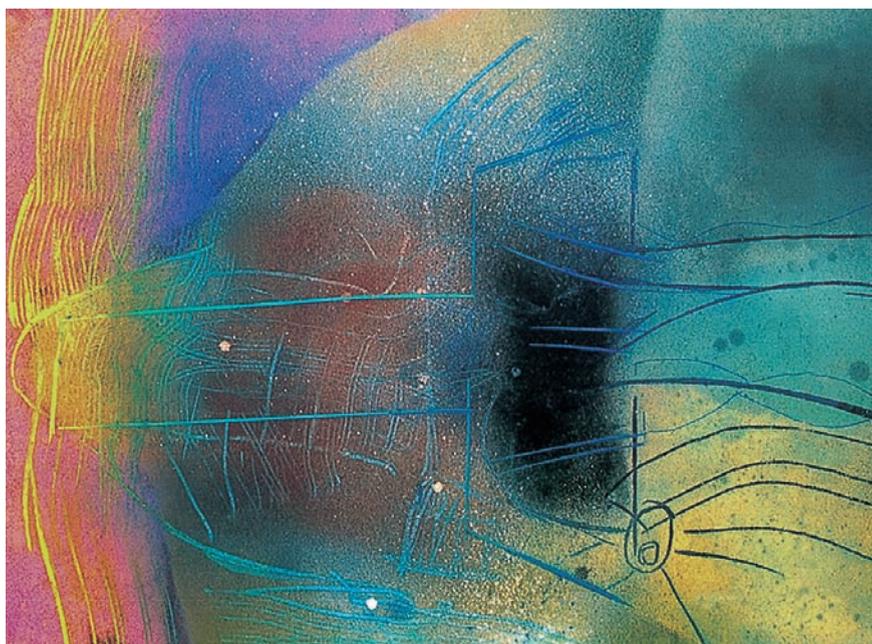
El máximo rendimiento que se puede obtener de un cluster Beowulf es cuando se destina completamente a una aplicación específica y se sintoniza para ella. Los clusters no son la solución para todos los problemas relacionados con cálculos intensivos, sobre todo en situaciones en las que las aplicaciones tienen un grado de paralelismo muy bajo y sus requerimientos de memoria son muy grandes.

Durante la construcción de un cluster Beowulf siempre debe prevalecer la mejor relación costo-beneficio[8], tomando como base las características de las aplicaciones a emplear.

Notas

¹ La función de onda contiene toda la información posible que se puede obtener del sistema en cuestión.

² La comprensión más notable de una estructura molecular durante este periodo ocurrió en 1953, con el descubrimiento, realizado por Watson y Crick, de la estructura de doble hélice del ADN.



Recostada con bruma, 1999. Pablo Amor. Óleo sobre tela (75 x 180 cm). Detalle.

³ En promedio la vida útil de una supercomputadora es del orden de siete años, al cabo de ese periodo es necesario reemplazar totalmente el equipo, debido principalmente a los altos costos de mantenimiento, que superan el beneficio que se obtiene. En general se debe mantener un equilibrio en la relación costo-beneficio.

⁴ El estándar actualmente en uso del modelo de envío de mensajes es el llamado Message Passing Interface (MPI).

⁵ 1Gflop = 1,000,000,000 de operaciones entre números reales por segundo.

⁶ En el momento de escribir este artículo,

M.C. Payne, D.C. Allan, "Solution of Schrödinger Equation for Large Systems", *Phys. Rev. B* **40** (1989) 12255-12262.

⁴ Lista de junio de 2005, <http://www.top500.org> presentado por la Universidad de Manheim, Tennessee.

⁵ C.C. Díaz, I.G. Kaplan, S. Roszak, "Theoretical study of the electron affinities of the alkaline-earth tetramers possessing the Td symmetry: Be₄ and Mg₄", *J. Mol. Model.* **11** (2005) 330-334.

⁶ E. Apra, *et al.*, "NWChem, A Computational Chemistry Package for Parallel

Computers, Version 4.7", 2005.

⁷ M. Hussain, R. Radhakrishnan, K. Chalavada, "Understanding the Scalability of NWChem in HPC Environments" *Technical Papers, Dell Power Solutions*, 2005.

⁸ T. Sterling, J. Salmon, D.J. Becker, D.F. Savarese, *How to Build a Beowulf: A guide to the Implementation and Application of PC Clusters*, MIT Press, Londres, 1999.

⁹ M.J. Frish, *et al.*, Gaussian D3, Revision B. 05; Gaussian, Pittsburgh, 2003.

*ccdiazt@ipicyt.edu.mx

Los clusters Beowulf revolucionaron el mundo del supercómputo al ofrecer soluciones ingeniosas y de bajo costo para resolver problemas científicos muy complejos

lo, Intel ya tiene en el mercado procesadores Pentium IV con frecuencias de 3.8 GHz con HT; no se utilizaron en la comparación porque desconozco el precio aproximado en el mercado, que debe estar por debajo del más veloz de la serie Itanium2.

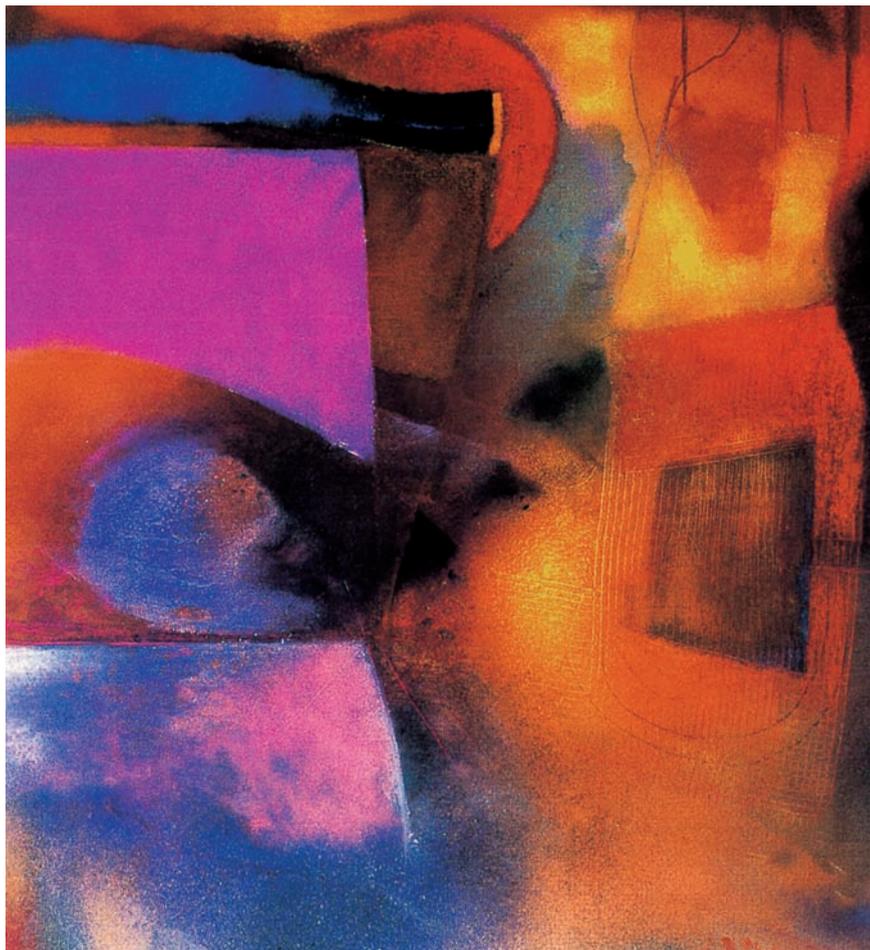
⁷ Relación de transferencia = [frecuencia del bus de la memoria (MHz)] · [2 (Doble Data Rate)] · [8 (número de bytes transferidos por vez)].

⁸ Existen dos tiempos importantes a considerar en el momento de realizar un cálculo: el tiempo de procesador y el tiempo de pared; el primero se refiere al tiempo que le tomó a los procesadores concluir el cálculo; el tiempo de pared es el tiempo que el usuario tiene que esperar para obtener el resultado. En general el tiempo de pared es varias veces mayor que el del procesador.

Bibliografía

¹ I.G. Kaplan, *Molecular Interactions*, Elsevier, Amsterdam, 1986.

² B.R. Brooks, R.E. Bruccoleri, B.D. Olafson, D.J. States, S. Swaminathan, M. Karplus, "CHARMM: A program for Macromolecular Energy, Minimization, and Dynamics Calculations", *J. Comput. Chem.*, **4** (1984) 187-217.³ M.P. Teter,



Mirada morada, 1999. Pablo Amor. Óleo sobre tela. (100 x 90 cm).

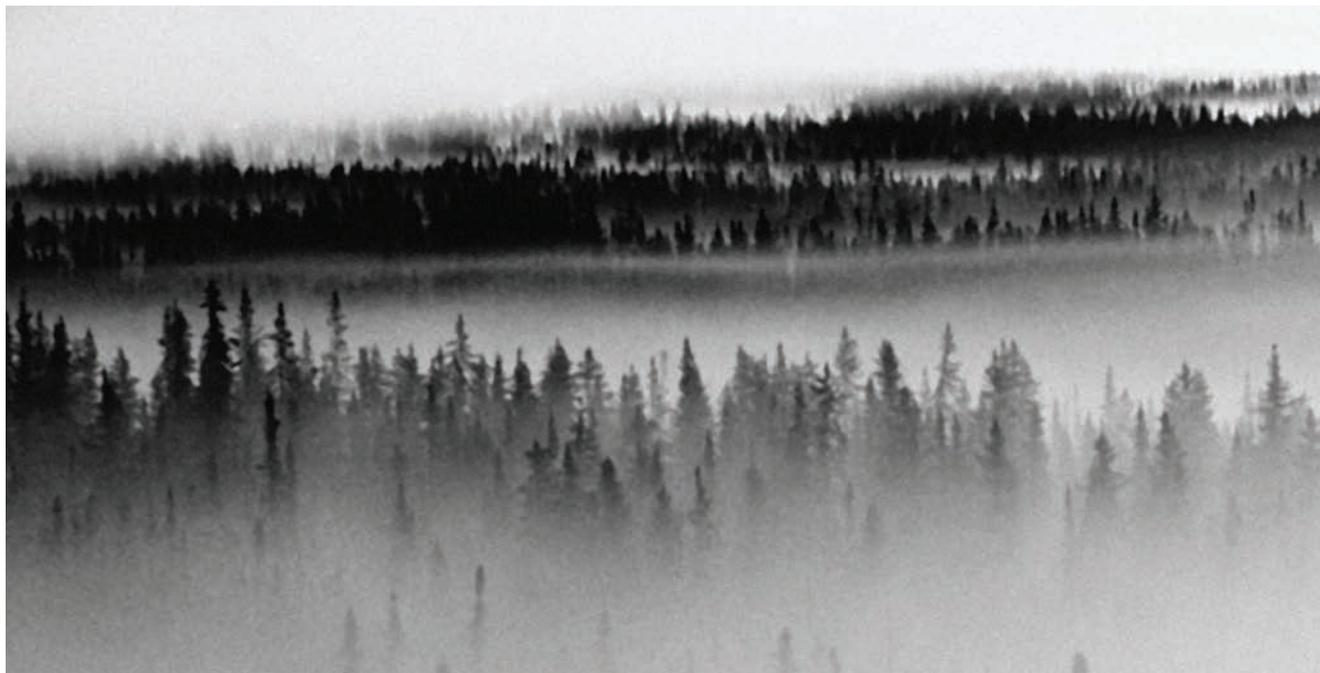
Roberto Escudero, Premio Universidad Nacional Autónoma de México

Pedro Bosch, Larissa Alexandrova y Ana Martínez, IIM, UNAM.

Roberto Escudero, uno de los editores de nuestra revista, ha obtenido el premio Universidad Nacional Autónoma de México en su edición 2005. Es tanto el orgullo, que no podemos renunciar a escribir una nota destacando sus méritos y su infatigable empeño, tanto en formar científicos competentes como en investigar en la frontera de la física. Este premio no pasa de ser un reconocimiento tardío a un trabajo constante y tesonero centrado en la superconductividad. Aquí podríamos describir con todo detalle los aportes del profesor, del investigador y de la persona al avance del conocimiento. Sin embargo, está a la disposición de quien lo desee un artículo biográfico en la *Gaceta UNAM*. El propio Escudero, en el número uno de *Materiales avanzados*, describe parte de sus intereses más recientes: sistemas nanoscópicos, superconductividad

y cuasicristales. No tiene caso repetir lo ya escrito y es aún menos de nuestro agrado caer en las tablas de “número de artículos publicados (son más de 138), citas (1100 veces), etcétera”; Roberto Escudero está muy por encima de todo eso. Tan es así que tenemos frente a nosotros una densísima semblanza de seis páginas en la que se destaca que se doctoró en la Universidad de Waterloo, Canadá, con una investigación sobre superconductividad, y llevó a cabo un posdoctorado con estudios de ondas de densidad de carga, que es un físico experimental, que ha montado a lo largo de treinta años uno de los laboratorios más equipados y completos del mundo para llevar a cabo estudios a bajas temperaturas y estudios de propiedades electrónicas.

Preferimos que el lector pase por el pasillo en donde se



Paisaje invernal.

encuentra el cubículo de Roberto Escudero en el IIM, su puerta está siempre abierta, y que le eche un ojo a Roberto. Quien no tenga esa posibilidad podrá observar la fotografía que anexamos. ¿Y eso por qué? Se nos ha ocurrido que se podría intentar adivinar la personalidad y los logros de nuestro compañero a partir de su apariencia. Así lo hizo Javier Marías en su libro *Miramientos* (Alfaguara, 1997) para presentar la vida de trece escritores españoles.

campos magnéticos intensos de hasta 17 teslas. Escoger sistemáticamente rayas o cuadros, que son patrones regulares, nos lleva a los materiales cristalinos, a los cerámicos como el $\text{PrBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ o el $\text{Ba}_{1-x}\text{K}_x\text{BiO}_3$ que tan bien conoce. La manga corta de las camisas puede estar relacionada con uno de sus rasgos caracterológicos más típicos y es su transparencia. Se deja ver. Nadie puede darse por engañado, Roberto es “transparente”, todos sabemos lo que piensa y, si no, basta pregun-

Roberto Escudero es un hombre preocupado por la precisión de las medidas, por la transparencia, por la ciencia...

La primera impresión cuando uno se encuentra con Roberto Escudero, y así lo hemos discutido nosotros tres, es su extrema pulcritud. Las camisas casi siempre de rayitas son, en general, de manga corta y son las más planchadas del instituto. No cabe duda de que este rasgo delata a un individuo preocupado por la exactitud, por la precisión desmedida de las medidas. Y no nos equivocamos: en el laboratorio de Roberto Escudero se miden temperaturas de 10 mK en presencia de

társelo. Creemos que en todo el IIM no hay quien tenga una mirada tan inquisitiva y aguda a pesar de los lentes, que son los más sobrios: un par de vidrios montados en unos alambres que apenas brillan. Ningún asomo de coquetería ni en el peinado ni en la sonrisa. Es quizá esta claridad y esta nitidez en el pensamiento y en la actitud las que lo han hecho popular entre los estudiantes. Ha dirigido los trabajos de más de treinta estudiantes de diversos grados (diecisiete tesis de licenciatura, ocho de maestría, ocho de doctorado y cuatro trabajos posdoctorales). Ha impartido una infinidad de cursos. Y sin embargo, el primer contacto con Roberto es siempre “gélido”, los colores fríos, usualmente tirando hacia el azul, de su ropa no desmienten esta observación. Para comunicarse con él hay que “tunelar” esa barrera, y es que Escudero maneja la espectroscopia de túnel electrónico y la de contactos puntuales y ha hecho tan suya la técnica que ya forma parte de su propio comportamiento.

Ahora bien, si se logra cruzar ese corredor y se alcanza al otro Roberto, aparece un científico apasionado, con un intenso brillo en los ojos que se intensifica cuando platica de sus experimentos. Roberto en el fondo, y no tan en el fondo, es una persona cálida y dispuesta siempre a explicarte, constantemente intentando compartir el conocimiento. Cuando lo hace se pone serio y formal, pero siempre termina con una sonrisa satisfecha. Como buen investigador sabe distinguir y apreciar al buen colega, reconoce al buen investigador o al buen profesor y sin duda lo valora, pero eso sí, perdona poco al que se equivoca. Así es Roberto Escudero, quien por su inteligencia y por su enorme capacidad de trabajo es hoy galardonado con el Premio Universidad Nacional.

¡Felicidades, Roberto! —

