

ARTÍCULO

SUPERCÓMPUTO EN LA FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA: DOS EJEMPLOS

Luis Antonio Pérez

Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México

Resumen

En este artículo se hace un breve bosquejo de las aplicaciones del supercómputo en la física y, en particular, en la física de la materia condensada. Se dan ejemplos de su uso en dos campos diferentes como lo son el estudio de la superconductividad y la investigación de las propiedades físicas de los nanocúmulos bimetalicos.

Palabras clave: supercómputo, física, Superconductividad

Abstract

This article gives a brief outline of supercomputing applications in physics and, in particular, in condensed matter physics. Examples are given of its use in two different fields, such as the study of superconductivity and the investigation of physical properties of bimetallic nanoclusters.

Key words: supercomputing, superconductivity, physics.

Introducción

El uso de supercomputadoras en la física ha tenido una larga tradición que se remonta al nacimiento de la primera computadora electrónica ENIAC (Electronic Numerical Integrator And Computer) en la década de los cuarenta del siglo pasado y que fue utilizada en cálculos relacionados con la bomba de hidrógeno. [1] Los problemas físicos que se han abordado desde entonces comprenden el estudio del clima y la predicción del tiempo, la detonación de bombas nucleares, el modelaje de moléculas y cúmulos atómicos y, en cosmología, la simulación de muchos cuerpos interactuando gravitacionalmente, por mencionar algunos. También la simulación del comportamiento de fluidos ha sido tradicionalmente una línea de investigación, tanto en ingeniería como en geofísica y astrofísica, que requiere el uso del cómputo intensivo para resolver de manera numérica las complejas ecuaciones de la dinámica de fluidos. [2] Asimismo, ha adquirido un gran auge la llamada química computacional, la cual incorpora los resultados de la química teórica en programas computacionales para calcular las estructuras y las propiedades de las moléculas. [3] Estos estudios computacionales pueden servir de punto de inicio para llevar a cabo un experimento en el laboratorio, o bien, para comprender datos experimentales. También pueden servir para predecir la posible existencia de alguna molécula aún no sintetizada, o bien explorar reacciones químicas que no pueden investigarse fácilmente en el laboratorio. Otro campo que requiere el uso de supercómputo, es la física de la materia condensada, la cual investiga las propiedades físicas, tanto macroscópicas como microscópicas de la materia en una fase condensada, la cual aparece cuando el número de átomos que constituyen el sistema es grande y las interacciones entre ellos son fuertes. Ejemplos típicos de materia condensada son los sólidos y los líquidos, los cuales tienen su origen en las fuerzas electromagnéticas entre átomos. También existen fases más exóticas de la materia condensada, tales como el estado superconductor; las fases ferromagnéticas y antiferromagnéticas de sistemas de espines, y el condensado de Bose-Einstein que se encuentra en ciertos sistemas diluidos de átomos ultrafríos (con temperaturas del orden de nanokelvins). Cabe mencionar que existe un subcampo de la materia condensada que se conoce como materia condensada “suave” y que comprende el estudio de sistemas tales como coloides, polímeros, espumas, geles y materiales granulares.

El común denominador de los sistemas que estudia la física de la materia condensada es que todos ellos constan de N partículas que interactúan entre sí, lo que en física se conoce como el “problema de muchos cuerpos” y para el cual, en general, no se conoce la solución analítica cuando $N > 2$, por lo que su solución requiere de cálculos numéricos. Obviamente, si el número de partículas que existe en el sistema bajo estudio es del orden del número de Avogadro ($N \approx 10^{23}$), [4] resulta completamente impráctico llevar un registro de las posiciones y velocidades de cada partícula (desde el punto de vista de la mecánica clásica) o bien, de la función de onda de N partículas, si el sistema es descrito mediante la mecánica cuántica. En este caso siempre es necesario hacer aproximaciones, utilizar

métodos de renormalización o de escalamiento, o bien restringir el estudio a sistemas más pequeños. En este artículo revisaremos, a manera de ejemplo, la utilidad del supercómputo en dos áreas de la física de la materia condensada: la superconductividad y los nanocúmulos bimetálicos.

Superconductividad

La superconductividad es uno de los fenómenos más interesantes de la física, porque es una manifestación macroscópica del comportamiento cuántico de la materia, donde la correlación electrónica juega un papel fundamental. El estado superconductor aparece en ciertos materiales cuando son enfriados por debajo de cierta temperatura (llamada *temperatura crítica*).

Los materiales en este estado se caracterizan por presentar resistencia eléctrica cero y por expulsar el campo magnético de su interior (efecto Meissner). Las posibilidades tecnológicas de estos materiales son enormes y comprenden desde su aprovechamiento en líneas de conducción de electricidad hasta su uso en trenes levitados. Sin embargo, las bajas temperaturas que se necesitan para mantenerlos en el estado superconductor han limitado su uso a equipos que requieren de dispositivos de enfriamiento bastante costosos. A finales de los años cincuenta del siglo pasado surgió una teoría, llamada BCS en honor de sus autores Bardeen, Cooper y Schrieffer, [5] que describe bastante bien las propiedades físicas de los superconductores conocidos hasta entonces (llamados superconductores *convencionales*) y cuyas temperaturas críticas no exceden los 25 Kelvin. Sin embargo, en 1986 se descubrió una nueva familia de superconductores, [6] cuyas temperaturas críticas superaron los 77 Kelvin [7] (que es la temperatura de licuefacción del nitrógeno a presión atmosférica), y que hoy se conocen como *superconductores de alta temperatura crítica*, o bien como cupratos superconductores, ya que todos ellos contienen planos atómicos de cobre y oxígeno.

A pesar de que han transcurrido más de 20 años desde su descubrimiento, hoy en día no existe ninguna teoría que explique cómo surge el estado superconductor en estos materiales. Es por ello que la investigación teórica en este campo sigue muy activa. Además, este conocimiento podría permitir el desarrollo de nuevos materiales que sean superconductores a temperaturas aún más altas, quizá a temperatura ambiente, lo cual desencadenaría una nueva revolución industrial y tecnológica. El misterio que aún no ha sido resuelto es por qué los electrones en estos materiales se unen para formar pares, llamados pares de Cooper, los cuales se encuentran en un estado que puede conducir corriente eléctrica sin resistencia. Para ello se ha propuesto una gran variedad de modelos teóricos, muchos de ellos basados en hamiltonianos fermiónicos como el de Hubbard, el cual considera la interacción electrón-electrón de manera local, es decir, supone que los electrones de conducción solamente interactúan cuando se encuentran en átomos vecinos o en un mismo átomo. La solución de la ecuación de Schrödinger con este hamiltoniano, que daría la función de onda del estado base, ha resultado un gran reto teórico-computacional. Podemos mencionar, a manera de ejemplo, dos formas de abordar este problema, pero todas llevan ineludiblemente al empleo de supercomputadoras, como veremos a continuación.

Un método consiste en diagonalizar de manera exacta la matriz hamiltoniana para sistemas pequeños, lo cual permite examinar tendencias en las correlaciones de muchos electrones. Este método es particularmente útil para interacciones de corto alcance, en donde el tamaño finito del sistema no tiene efectos muy importantes, y los resultados obtenidos pueden utilizarse para comprobar los resultados de otros métodos aproximados. Técnicamente, la diagonalización exacta consiste en resolver el problema de eigenvalores (o valores propios) de una matriz hamiltoniana dada. En general, el tiempo de cómputo que requiere la operación matemática de diagonalizar una matriz escala con el cubo de la dimensión de la matriz. [8] Esto significa que, por ejemplo, un cálculo de este tipo en una matriz dos veces más grande requerirá 8 veces más tiempo, mientras que un sistema 10 veces más grande tomará un tiempo ¡1000 veces mayor! Para un modelo de electrones, como el de Hubbard, una base ortonormal natural del espacio de Hilbert [9] asociado al sistema, es la base de los números de ocupación de los electrones, la cual incluye los estados que describen todas las posibles distribuciones de N_{\uparrow} electrones con espín hacia arriba y N_{\downarrow} electrones con espín hacia abajo en una red de N átomos o sitios. De esta manera, la dimensión M del espacio de Hilbert está dada por $M = \binom{N}{N_{\uparrow}, N_{\downarrow}}$, donde $N = N_{\uparrow} + N_{\downarrow}$. Para un sistema de 20 sitios ($N=20$) y 10 electrones con espín hacia arriba y 10 electrones con espín hacia abajo ($N_{\uparrow}=N_{\downarrow}=10$), esta dimensión es 3.4×10^{10} , mientras que para un sistema con 30 sitios y 15 espines de cada orientación, esta

dimensión es del orden de 2.4×10^{16} . Como la matriz hamiltoniana es de tamaño $M \times M$, este método solamente puede aplicarse a sistemas muy pequeños y, aún así, se requiere de una gran capacidad de cómputo. Cabe mencionar que el uso de simetrías del hamiltoniano permite reducir considerablemente el tamaño de la matriz a diagonalizar. A manera de ejemplo, podemos mencionar que uno de los problemas a los que se enfrenta un investigador, al utilizar el método de diagonalización exacta, es el almacenamiento de los elementos de la matriz hamiltoniana en la computadora para realizar cálculos con ellos. Para ello existen diversas posibilidades. Una de ellas es guardarlos en la memoria RAM de la computadora, pero obviamente existen limitaciones de espacio para ello. También podrían guardarse en el disco duro, lo que en principio es posible debido al enorme espacio en disco que tienen la mayoría de las computadoras, pero la rapidez de acceso a disco es menor que el tiempo que requiere el acceder a la memoria RAM. Finalmente, dichos elementos de matriz pueden calcularse cada vez que se necesiten, lo que permite aprovechar la rapidez de los procesadores de la supercomputadora, además de facilitar la paralelización de los procesos involucrados.

El método de diagonalización exacta se emplea hoy en día no sólo para investigar modelos fermiónicos como el de Hubbard, sino también el magnetismo cuántico, el efecto Hall cuántico fraccionario y el método de interacción de configuraciones de la química cuántica.

Otra forma de abordar la investigación del estado superconductor, a partir de modelos electrónicos como el de Hubbard, consiste en realizar aproximaciones de tipo campo medio en el hamiltoniano. De esta manera algunas cantidades físicas involucradas en el problema, representadas por operadores cuánticos, se reemplazan por sus valores promedio. A partir de un formalismo sofisticado, la determinación de las propiedades físicas del estado superconductor puede reducirse a un par de ecuaciones integrales acopladas con dos incógnitas, que son la brecha superconductora y el potencial químico del sistema. [10] Aquí aparecen dos problemas que requieren, otra vez, de alta capacidad de cómputo. Por una parte, se emplean algoritmos numéricos para resolver ecuaciones acopladas que requieren calcular dichas ecuaciones en un gran número de puntos en el espacio de las soluciones. Asimismo, cada evaluación de las ecuaciones implica el cálculo de integrales complejas, [11] cuya dimensión es la misma que la del sistema bajo estudio y que requieren de millones de evaluaciones de las funciones integrando, por lo que la rapidez de los procesadores utilizados en los cálculos numéricos juega un papel primordial para la obtención de resultados en un tiempo razonable.

Para finalizar hay que señalar que, además de los métodos numéricos mencionados, hay otros que también son muy utilizados en la investigación de modelos electrónicos, como por ejemplo el método de Monte Carlo cuántico y el grupo de renormalización de la matriz densidad. Este último es, hoy en día, el método más eficiente para estudiar la correlación electrónica en sistemas unidimensionales.

Cúmulos bimetalicos

Otro ejemplo que ilustra el empleo de supercomputadoras en la física, es el estudio de las propiedades estructurales y electrónicas de nanocúmulos bimetalicos. Los nanocúmulos son agregados de tamaño nanométrico de átomos o moléculas, cuyo número está entre 10 y 10^6 . Los nanocúmulos bimetalicos, también llamados nanoaleaciones, están formados por dos tipos de átomos metálicos y se caracterizan por el hecho de que sus propiedades químicas y físicas pueden regularse variando no solamente el tamaño y el ordenamiento atómicos (como ocurre con los nanocúmulos monometálicos), sino también cambiando su composición. Esto abre el camino para una gran variedad de aplicaciones potenciales. En particular, variando las estructuras y composiciones de ciertas nanoaleaciones es posible modificar dramáticamente sus actividades catalíticas. Más aún, los catalizadores bimetalicos presentan generalmente un mucho mejor desempeño que los catalizadores monometálicos. [12] Estas nanoaleaciones también son interesantes porque presentan estructuras y propiedades distintas a las de los cúmulos de elementos puros. Inclusive existen ejemplos de pares de elementos, como el hierro y la plata, que son inmiscibles en una fase macroscópica pero se mezclan fácilmente en nanocúmulos. [13]

En general, resulta importante encontrar la configuración de mínima energía de un nanocúmulo con una composición y tamaño dados, ya que dicha configuración determina en gran medida su comportamiento físico y químico. Para encontrar de manera teórica dicha configuración, se puede emplear una metodología que combina los dos grupos

tradicionales en los que se divide la simulación computacional. Uno de estos grupos es el formado por los métodos atomísticos o clásicos, y el otro grupo está formado por los métodos *ab initio* o de primeros principios. En los primeros, los átomos que forman el material interactúan mediante potenciales modelo, cuyos parámetros se ajustan a partir de observables experimentales del sistema en cuestión, por lo que también son llamados potenciales semiempíricos. Por otra parte, en los métodos *ab initio* se resuelve la ecuación de Schrödinger con diferentes grados de aproximación para el hamiltoniano que, en principio, toma en cuenta las interacciones electrón-electrón, electrón-núcleo y núcleo-núcleo que hay en el sistema. Idealmente, los únicos datos empíricos que entran en los cálculos *ab initio* son los valores de las constantes físicas fundamentales. La complejidad inherente de este tipo de cálculos hace que su uso en la búsqueda de la configuración de mínima energía de un nanocúmulo, sea muy costoso desde el punto de vista computacional. Es por esto que generalmente se utilizan los métodos atomísticos, junto con un algoritmo de optimización global, para encontrar las configuraciones de energía más baja, las cuales corresponden a los mínimos más profundos de la superficie, o hipersuperficie, de energía potencial (PES, por sus siglas en inglés).

La dimensionalidad del hiperespacio para la búsqueda de la configuración de mínima energía de un cúmulo atómico, crece linealmente con el número de átomos, pero el número de mínimos locales en la PES crece mucho más rápidamente. De hecho hay indicaciones de que este número crece exponencialmente con el número de átomos en el sistema. [14] Más aún, al pasar de nanocúmulos formados por un solo tipo de átomo a nanoaleaciones, hay un incremento en la complejidad del problema, debido a la presencia de dos tipos de átomos, lo que lleva a la existencia de homótopos que son cúmulos formados por n átomos del tipo A y m átomos del tipo B, es decir A_nB_m , con un número fijo de átomos ($N=n+m$ fijo), una composición determinada (m/n fijo) y que tienen el mismo arreglo geométrico, pero que difieren únicamente en la forma en que los átomos A y B están distribuidos. Es decir, para cada configuración geométrica existen homótopos. Por ejemplo, para un cúmulo de 30 átomos $A_{15}B_{15}$, hay 155117520 homótopos, aunque algunos de ellos pueden ser equivalentes si el arreglo geométrico subyacente presenta simetrías. De esta manera, la PES de un cúmulo binario puede presentar un número inmensamente mayor de mínimos locales que aquella de un cúmulo homogéneo del mismo tamaño. Por esta razón se necesita de un método eficiente de búsqueda de mínimos de energía en la PES. Uno de estos métodos es el de algoritmos genéticos, [15] el cual se puede usar en cualquier problema en el que se busque optimizar alguna función de muchas variables y, como lo indica su nombre, está basado en los principios de la evolución natural. En el caso que nos interesa, este método asigna un "código genético" a una configuración particular del cúmulo. Una población de configuraciones generadas al azar se toma como primera generación. Las poblaciones de las siguientes generaciones se "reproducen" a partir de las generaciones anteriores mediante la aplicación de operadores análogos a los procesos evolutivos (tales como el entrecruzamiento y la mutación) a los códigos genéticos de los individuos mejor adaptados (configuraciones de menor energía). De esta manera, las configuraciones de los cúmulos "evolucionan" a través de las generaciones hacia la geometría de menor energía. [16] Generalmente esto implica millones de evaluaciones de la energía potencial para cúmulos de alrededor de 50 átomos.

La naturaleza global de este método se debe a que permite escapar de los mínimos locales a través de la aplicación de los operadores genéticos. La combinación de este método, junto con un potencial semiempírico para calcular la energía potencial del cúmulo (y que es computacionalmente menos costoso que un cálculo *ab initio*), permite obtener una distribución de configuraciones de menor energía en un tiempo de cómputo razonable. Estas configuraciones, a su vez, pueden ser reoptimizadas localmente usando métodos *ab initio*, como el de la "Teoría del Funcional de la Densidad" (DFT, por sus siglas en inglés), la que también permite estudiar efectos físicos relevantes para las nanoaleaciones -como el de la transferencia de carga- los cuales no son incluidos a través del modelado con potenciales semiempíricos. [17] Antes de concluir, debemos mencionar que DFT es un método muy utilizado hoy en día para estudiar las propiedades físicas de moléculas, cúmulos y sólidos, y cuya implementación computacional constituye un campo muy vasto de investigación que involucra a físicos, químicos y programadores.

Conclusiones

El supercómputo representa actualmente una parte fundamental de la investigación de frontera en muchos campos de la física, tales como la mecánica de fluidos, la astrofísica, la geofísica, la física de partículas y la física de la materia

condensada. En este artículo hemos esbozado cómo la rapidez de los procesadores y la posibilidad de paralelizar los algoritmos numéricos, pueden incidir en el progreso de la investigación en dos campos particulares de la física de la materia condensada, como lo son la superconductividad y los nanocúmulos atómicos. El desarrollo que ha tenido el supercómputo ha permitido y permitirá abordar problemas científicos que hasta hace unos pocos años eran imposibles de tratar.

Referencias

- [1] Carlos A. Coello Coello. *Breve historia de la computación y sus pioneros*. Fondo de Cultura Económica, 2003
- [2] E. Ramos, G. Cisneros, R. Fernández-Flores, A. Santillán-González "Computational Fluid Dynamics" (Proceedings of the Fourth UNAM Supercomputing Conference). Eds. , World Scientific, 2000
- [3] C.J. Cramer, *Essentials of Computational Chemistry: Theories and Models*, Wiley, 2002
- [4] El número de Avogadro, $N_A \approx 6.022 \times 10^{23}$ corresponde al número de moléculas que se encuentran en un mol de una sustancia dada, donde la masa de un mol de sustancia corresponde a la masa molecular (de las moléculas que la componen) expresada en gramos.
- [5] J. Bardeen, L.N. Cooper, J.R. Schrieffer, "Theory of Superconductivity", *Physical Review* (1957) 108, 1175
- [6] J. G. Bednorz and K. A. Müller, *Possible high Tc superconductivity in the Ba-La-Cu-O system*, *Z. Physik. B* (1986) 64, 189
- [7] M. K. Wu, J. R. Ashburn, C. J. Torng, P. H. Hor, R. L. Meng, L. Gao, Z. J. Huang, Y. Q. Wang, and C. W. Chu, Superconductivity at 93 K in a New Mixed-Phase Y-Ba-Cu-O Compound System at Ambient Pressure, *Physical Review Letters*, (1987) 58, 908
- [8] M.J. Field, *A practical introduction to the simulation of molecular systems*, Cambridge University Press, 2007
- [9] Los sistemas cuánticos son descritos por funciones o vectores de onda. Cualquier función de onda de un sistema dado puede escribirse como una combinación lineal de un conjunto de funciones base. El conjunto de funciones que se pueden representar a partir de esta base es el espacio de Hilbert del sistema.
- [10] G. Rickayzen, *Theory of superconductivity*, Interscience Publishers, New York, 1965
- [11] L.A. Pérez, J.S. Millán, E. Shelomov, C. Wang, "Analysis of the BCS equations for anisotropic superconductivity", *Journal of Physics and Chemistry of Solids* (2008) 69, 3369
- [12] J.H. Sinfelt, *Bimetallic Catalysts: Discoveries, Concepts and Applications*, Wiley, New York, 1983
- [13] Andrews, M. P.; O'Brien, S. C. "Gas-phase "molecular alloys" of bulk immiscible elements: iron-silver (FeAg)", *Journal of Physical Chemistry* (1992) 6, 8233
- [14] J.P.K. Doye, D. Wales "Calculation of thermodynamic properties of small Lennard-Jones clusters incorporating anharmonicity", *Journal of Chemical Physics* (1995) 102, 9659
- [15] J. Holland, *Adaptation in Natural and Artificial Systems*, Univ. Michigan, Ann Arbor, 1975.
- [16] K. Michaelian, "A symbiotic algorithm for finding the lowest energy isomers of large clusters and molecules", *Chemical Physics Letters* (1998) 293, 202

[17] E.M. Fernández, L.C. Balbás, L.A. Pérez, K. Michaelian, I.L. Garzón "Structural properties of bimetallic clusters from density functional calculations", *International Journal of Modern Physics B*, 2005, pp. 19, 2339. A. Radillo-Díaz, Y. Coronado, L.A. Pérez, I.L. Garzón, "Structural and electronic properties of PtPd and PtNi nanoalloys", *European Physical Journal D* (2009) 52, 127

