

Del mundo cuántico a la supercomputación: explorando la materia desde MANDRA, UAEMex



Gutiérrez Valdés, Jafet. Doctor en Ciencias, Beneficiario del Programa Cátedras COMECyT. Facultad de Ciencias: Licenciatura de Física en la Universidad Autónoma del Estado de México.



Gutiérrez Valdés, Iasser. Doctor en Ciencias, Facultad de Ciencias: Licenciatura de Física en la Universidad Autónoma del Estado de México.



Vidal-López, Rodrigo. Candidato a Doctor en Ciencias de la Ingeniería, Técnico Académico de Tiempo Completo. Responsable del Centro de Innovación Digital "Mandra" en la Universidad Autónoma del Estado de México



Díaz Sánchez, Luis Enrique. Doctor en Ciencias, Profesor-Investigador de la Facultad de Ciencias, UAEMex, adscrito al Cuerpo Académico de Interacción de Radiación con la Materia. Es miembro del Sistema Nacional de Investigadores, Nivel 2.



Figura 1.A.- Obra civil en funcionamiento, logo de MANDRA (Centro de Innovación Digital), UAEMex. (Imagen tomada de internet).

Resumen:

¿Cómo se estudia un átomo sin tocarlo? ¿Cómo se observa algo tan pequeño que ningún microscopio puede ver directamente? Para responder estas preguntas, los científicos recurren a supercomputadoras: máquinas capaces de recrear la materia a partir de sus componentes más básicos. En la Universidad Autónoma del Estado de México, Campus El Cerrillo, la supercomputadora del Centro de Innovación Digital MANDRA permite estudiar nanopartículas (partículas 80 000 veces más delgadas que un cabello humano) mediante simulaciones de primeros principios basadas en las leyes de la mecánica cuántica.

Estas nanopartículas, formadas por metales de transición, destacan por generar o responder con gran sensibilidad a los campos magnéticos, lo que las convierte en candidatas ideales para tecnologías médicas, recubrimientos aeronáuticos y dispositivos de almacenamiento de información.

Esta supercomputadora impulsa proyectos estratégicos, fortalece colaboraciones nacionales y contribuye a transformar la manera en que se hace ciencia en México.

ANTECEDENTES

El Centro de Innovación Digital MANDRA (Figura 1) surge como un espacio de convergencia entre la ciencia computacional, la física de materiales y la innovación tecnológica. El nombre "Mandra", además de su identidad gráfica, evoca a la salamandra, un organismo cuya estructura y capacidades naturales simbolizan varias de las virtudes del centro:

- *Patas múltiples*, asociadas al movimiento coordinado, análogas a los nodos que trabajan en paralelo dentro del clúster de supercómputo.
- *Capacidad de regeneración*, reflejada en la resiliencia del sistema ante fallos.
- *Cuerpo flexible*, equivalente a una arquitectura computacional adaptable a distintos proyectos científicos.
- *Velocidad y precisión*, comparables con la alta velocidad de cálculo.
- *Mirada focalizada*, paralela al procesamiento dirigido y eficiente de datos.

Desde su fundación, MANDRA ha consolidado su posición como un nodo de investigación avanzada en física computacional, con énfasis en el estudio de nanoestructuras de carbono y metales de transición, especialmente en sus propiedades electrónicas, magnéticas y estructurales.

Pero, más allá de su origen y de sus características simbólicas, surge una pregunta natural: ¿qué sucede realmente dentro de MANDRA? Para comprender la relevancia de este centro, es necesario adentrarse en su actividad cotidiana: un laboratorio donde los experimentos no utilizan tubos de ensayo, sino modelos computacionales y ecuaciones que permiten explorar la materia a escalas imposibles de observar directamente.



Figura 1.B. - Obra civil en funcionamiento, logo de MANDRA (Centro de Innovación Digital), UAEMex. (Imagen tomada de internet).

UN LABORATORIO SIN TUBOS DE ENSAYO

En MANDRA estudiamos la materia desde sus componentes más pequeños —átomos y electrones— mediante métodos de primeros principios, los cuales permiten describir un material usando únicamente las leyes fundamentales de la mecánica cuántica, sin recurrir a experimentos tradicionales.

A diferencia de un laboratorio convencional, aquí los experimentos ocurren dentro de la computadora. Las simulaciones permiten observar cómo interactúan los electrones y los núcleos que forman un sistema, revelando las propiedades de la materia como si dispusiéramos de un microscopio capaz de ver lo que sucede a escala atómica.

El objetivo de estas simulaciones es encontrar la configuración de mínima energía de una nanopartícula, es decir, la disposición más estable que adoptaría en la naturaleza cuando no actúan fuerzas externas. A partir de ese estado fundamental es posible analizar sus propiedades electrónicas y magnéticas.

Podemos imaginar este proceso como resolver un rompecabezas de miles de piezas invisibles. Cada átomo aporta sus electrones y, entre todos, generan interacciones tan complejas que una computadora común no puede procesarlas. Las leyes cuánticas que gobiernan ese comportamiento no pueden resolverse exactamente, por lo que recurrimos a aproximaciones numéricas y al poder del supercómputo para obtener soluciones realistas.

Ahí es donde la supercomputadora se vuelve indispensable. En nuestro caso, utilizamos estas herramientas para estudiar nanopartículas de metales de transición y comprender cómo emergen sus propiedades electrónicas y magnéticas, así como la manera en que pueden modificarse al interactuar con superficies nanoestructuradas. Estas nanopartículas magnéticas son especialmente valiosas porque pueden emplearse en terapias médicas, sensores de alta precisión o dispositivos de almacenamiento avanzado.

Una forma intuitiva de entender estas propiedades es imaginar que la densidad electrónica está formada por miles de diminutos imanes. Cada electrón aporta un pequeño momento magnético, una contribución minúscula pero esencial que, al sumarse, da origen al magnetismo de las nanopartículas. Por ello, en muchas representaciones se muestra un ion rodeado por una nube de electrones cuyos espines se simbolizan mediante flechas que indican la dirección de su magnetización o del campo magnético (Figura 2).

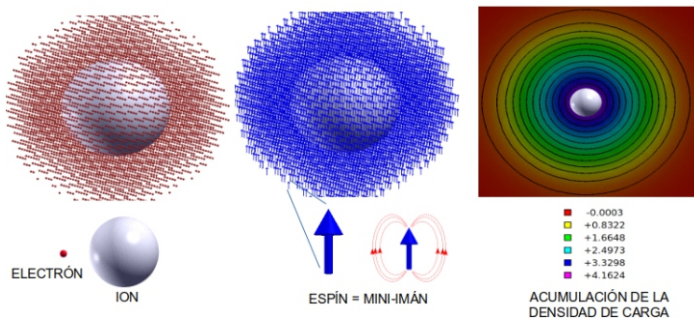


Figura 2. Representación de la densidad electrónica. Los electrones, mostrados como pequeñas flechas alrededor del núcleo, se comportan como diminutos imanes que dan origen al magnetismo del material. La imagen permite apreciar cómo la densidad de electrones se concentra en ciertas regiones. (Imagen elaborada por los autores).

Estas imágenes muestran cómo muchos pequeños "imanes" se combinan para formar la distribución de carga y espín de un material. El último panel, obtenido de simulaciones, revela cómo la nube electrónica adopta patrones colectivos que dan origen a los campos magnéticos y a las propiedades únicas de las nanopartículas. Este conocimiento abre la puerta a nuevas tecnologías como almacenamiento avanzado, sistemas energéticos más eficientes y dispositivos cuánticos, y forma parte del trabajo que se realiza en el Centro de Innovación Digital MANDRA.

DE LOS ELEMENTOS A LAS APLICACIONES

Todo comienza con los metales de transición, elementos capaces de generar magnetismo y formar estructuras complejas a escala nanométrica. En MANDRA simulamos nanopartículas basadas en estos metales para comprender su comportamiento electrónico y magnético.

Después, comparamos estas simulaciones con resultados experimentales y analizamos qué ocurre cuando las nanopartículas se depositan sobre superficies nanoestructuradas, como el grafeno. Esta comparación entre teoría y experimento nos permite validar los modelos y avanzar hacia el diseño de materiales para memorias, sensores y tecnologías cuánticas del futuro (Figura 3).

Todas estas simulaciones, desde encontrar el estado más estable de un material hasta predecir nuevas propiedades, requieren una capacidad de cómputo gigantesca. Para modelar cada átomo, cada electrón y cada interacción cuántica, la computadora debe realizar millones de operaciones matemáticas al mismo tiempo. Por eso, antes de explorar los resultados, vale la pena comprender la tecnología que hace posible este tipo de investigación.

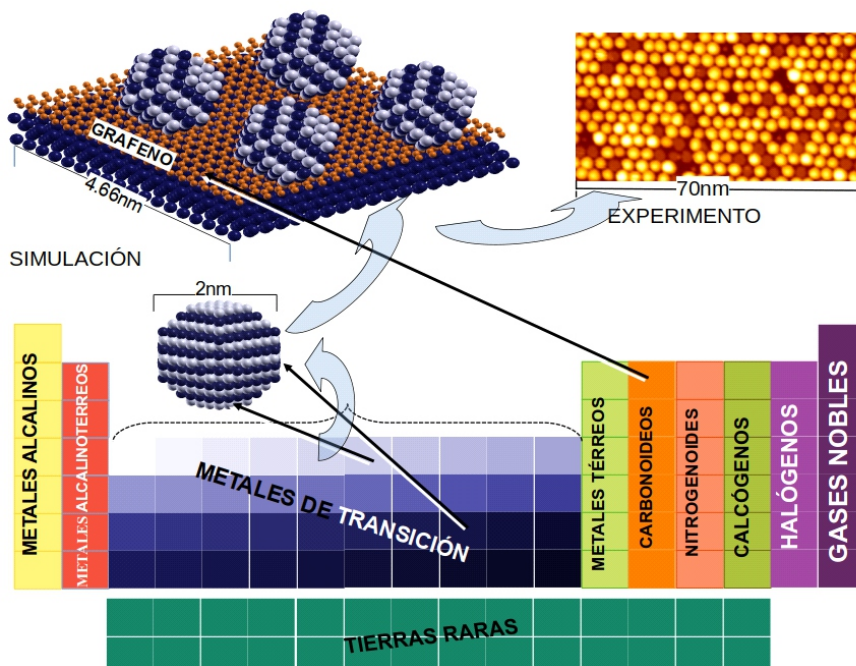


Figura 3. Esquema del estudio de nanopartículas basadas en metales de transición. La secuencia muestra cómo se diseñan las nanopartículas, cómo se comportan solas y al depositarse sobre superficies nanoestructuradas como el grafeno, y cómo los resultados de las simulaciones se comparan con datos experimentales (Imagen elaborada por los autores).

MANDRA COMO SUPERCOMPUTADORA

MANDRA es una supercomputadora formada por seis nodos de alto rendimiento (mandra-01 a mandra-06). Cada uno de ellos integra recursos diseñados para trabajar en paralelo y procesar grandes volúmenes de información. De manera simplificada, cada nodo cuenta con:

- Un nodo principal con 80 núcleos de CPU, encargado de la administración del clúster.
- Seis nodos secundarios con 80 núcleos de CPU cada uno, capaces de operar simultáneamente, como si 960 teléfonos inteligentes de gama alta procesaran datos al mismo tiempo.
- Hasta 385 GB de memoria RAM por nodo, equivalente a la memoria conjunta de unos 50 iPhones modernos trabajando en paralelo.
- Un sistema operativo Linux, que actúa como el arquitecto del sistema: organiza, coordina y mantiene en orden cada componente para garantizar un funcionamiento eficiente.

- El gestor de tareas SLURM, un coordinador inteligente que distribuye los cálculos entre los nodos y asegura que trabajen en sincronía, como un equipo de personas resolviendo un mismo problema sin estorbarse.
- Interconexión mediante tecnología InfiniBand de fibra óptica, que permite una comunicación ultrarrápida entre nodos.

En conjunto, MANDRA opera como un gran cerebro colectivo, donde cientos de procesadores colaboran para resolver en horas o días cálculos que una computadora personal tardaría semanas o meses en completar.

Detrás de este cerebro digital existe también un equipo interdisciplinario de investigadores, ingenieros y estudiantes que diseñan experimentos, analizan datos y transforman los resultados en conocimiento científico (Figura 4).



Figura 4. Equipo de trabajo de MANDRA. En la imagen se observa el cuarto blanco (SITE) donde se alberga el sistema de supercómputo, el clúster MANDRA conformado por varios nodos de alto rendimiento y el nodo maestro de administración (Imagen tomada de internet).



MANDRA EN EL CONTEXTO NACIONAL DE SOSTENIBILIDAD

Más allá de su capacidad técnica, la relevancia de MANDRA no se limita a su infraestructura, sino al impacto que genera dentro y fuera de la Universidad. La supercomputadora impulsa proyectos estratégicos, fortalece colaboraciones nacionales y contribuye a transformar la manera en que se hace ciencia en México. Por ello, es fundamental situarla dentro del ecosistema científico del país.

Los esfuerzos desarrollados en MANDRA forman parte de una estrategia científica nacional orientada a la innovación sostenible. En este marco, la Universidad Autónoma del Estado de México participa activamente en iniciativas como el Comité de Gestión por Competencias en Gestión Inteligente de Huella Ambiental, reconocido por el Consejo Nacional de Normalización y Certificación de Competencias Laborales (CONOCER). Este comité desarrolla estándares de competencia y certificación vinculados con la sostenibilidad, la innovación tecnológica y la eficiencia energética, alineando el trabajo de universidades, centros de investigación y el sector productivo.

Destaca también la colaboración con el Laboratorio Nacional EICAR, un consorcio integrado por la UAEMex, el CINVESTAV, la Universidad de Guadalajara, la Universidad de Sonora y el CICESE, que impulsa el uso del cómputo de alto rendimiento

para resolver problemas en energía, medio ambiente y biotecnología. La incorporación de la UAEMex a estos esfuerzos reafirma el papel de MANDRA como una infraestructura estratégica para el desarrollo de tecnologías limpias y la gestión inteligente de recursos, conectando la investigación básica con los objetivos de sostenibilidad y transformación digital del país.

Estas iniciativas muestran que MANDRA no solo es un espacio de investigación avanzada, sino un punto de encuentro entre la academia, la innovación tecnológica y las estrategias nacionales de sostenibilidad.

Comprender este panorama permite dimensionar la relevancia del trabajo que aquí se desarrolla y abre paso a una reflexión más amplia sobre el papel del supercómputo en el futuro científico del país. La supercomputadora no es un lujo: es una herramienta que abre oportunidades a estudiantes, docentes e investigadores interesados en comprender y transformar el mundo desde sus estructuras más pequeñas.

CONCLUSIÓN

La próxima vez que uses tu celular, veas una película en alta definición o escuches hablar de memorias cuánticas, piensa que detrás de esas tecnologías hay materiales diseñados desde los átomos. Y recuerda que en la UAEMex, gracias a su supercomputadora, se realizan cálculos que algún día podrían convertir esas ideas en realidades cotidianas.

Porque, al final, entre lo infinitamente pequeño de los átomos y lo inmensamente poderoso de una supercomputadora se encuentra la posibilidad de construir el futuro... y también el trabajo de las personas que, desde México, lo están haciendo posible.



Referencias:

- Capiod, P., Bardotti, L., Tamion, A., Boisson, O., Albin, C., Dupuis, V., Renaud, G., Ohresser, P. & Tournus, F. (2019). Elaboration of nanomagnet arrays: Organization and magnetic properties of mass-selected FePt nanoparticles deposited on epitaxially grown graphene on Ir(111). *Physical Review Letters*, 122, 06802. Disponible en: <https://hal.science/hal-0207539v1> [Consultado: 20 de octubre de 2025].
- Hasnig, P.J., Refson, K., Probert, M.I.J., Yates, J.R., Clark, S.J. & Pickard, C.J. (2014). Density functional theory in the solid state. *Philosophical Transactions of the Royal Society A*, 373. Disponible en: <https://royalsocietypublishing.org/doi/pdf/10.1098/rsta.2013.0270> (Consultado: 20 de octubre de 2025).
- Morales, R. (2025) Encabeza Massud comité para la gestión inteligente de la huella ambiental. *ASI Sucede*, (2025). Disponible en: <https://asisucede.com.mx/encabeza-mauricio-massud-comite-para-la-gestion-inteligente-de-la-huella-ambiental/> [Consultado: 17 de noviembre de 2025].
- Tamion, A., Tournus, F., Blanc, N., Hillion, A., Proux, O., Rogalev, A., Wilhelm, F., Gutierrez-Valdes, J., Diaz-Sanchez, L.E., Sato, K., Pastor, G.M. & Dupuis, V. (2022). Comparison of magnetic anisotropy and structural properties in chemically ordered CoPt and FePt nanoparticles. *Physical Review B*, 106. Disponible en: <https://hal.science/hal-02736439v1/file/essaiV2.pdf> [Consultado: 17 de noviembre de 2025].