

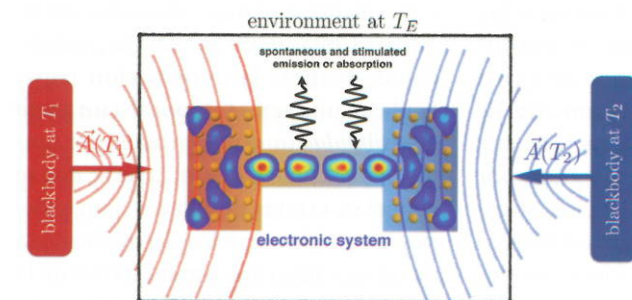
El magnesio comenzó a usarse en la fabricación de componentes de automóviles en los años 1930. Los primeros Volkswagen Beetle ya contenían unos 20 kg y el interés por este metal creció dramáticamente a comienzos del siglo XXI motivado por la necesidad de tecnologías limpias en los procesos industriales. María Teresa Pérez-Prado y Carmen María Cepeda-Jiménez, en el Instituto IMDEA Materiales de Madrid, han contado en la sección *News & Views* de *Nature* (doi:10.1038/528486a) cómo desde entonces **se han venido dedicando esfuerzos, en gran medida infructuosos, a incrementar su resistencia mecánica**. Por ejemplo, la precipitación de una distribución homogénea de partículas finas, que actúan como obstáculos para las dislocaciones, permitiendo así multiplicar la resistencia de algunas aleaciones de aluminio por cuatro o cinco, apenas consiguen doblar la resistencia de las aleaciones de magnesio. La dificultad reside en que, **debido a su red cristalina hexagonal**, es difícil conseguir una distribución de precipitados que obstaculice de forma eficaz el movimiento de los múltiples tipos de dislocaciones y maclas que en el magnesio se pueden activar en respuesta a una tensión aplicada. **Igualmente ineficaces han sido otras estrategias de endurecimiento consistentes en fabricar materiales compuestos mediante la adición de partículas de refuerzo** (generalmente con dimensiones mayores que una micra) cerámicas, metálicas o de nanotubos.

Las investigadoras del IMDEA describen como **una extensa colaboración estadounidense** (doi:10.1038/nature16445) **por primera vez ha conseguido** dispersar una elevada fracción en volumen (14 %) de nanopartículas cerámicas (diámetro medio de 60 nm) en una aleación Mg-Zn obteniendo **un comportamiento mecánico extraordinario**. Empiezan dispersando un 1 % en volumen en la matriz metálica en estado líquido, y luego evaporan parcialmente ésta en un horno de vacío para incrementar la fracción en volumen de partículas. El resultado de esa **adición de nanorefuerzos** es que la resistencia mecánica crece de 50 a 410 megapascals. Posteriormente, se consigue aumentar nuevamente la resistencia hasta 710 megapascals mediante el afino de

los granos cristalinos por deformación. Dada la enorme tendencia de las nanopartículas a aglomerarse, y perder así su eficacia, este trabajo constituye **un hito en el desarrollo de materiales ligeros de ultra alta resistencia**.

## UNA REPRESENTACIÓN GENERAL Y CONVENIENTE DEL TRANSPORTE DE CALOR

**P**rogresos en el control de sistemas a escala nanométrica han llevado, entre otras cosas, al desarrollo de la llamada **electrónica molecular** con expectativas de mejora en el rendimiento de los dispositivos optoelectrónicos y termoelectrónicos. En este contexto, Robert Biele y Roberto D'Agosta de la UPV/EHU han desarrollado con Ángel Rubio, también en el Instituto Max Planck en Hamburgo, una nueva teoría (<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.115.056801>) que, sin imponer parámetros externos mediando el concepto de temperatura local, **trata de forma conjunta el transporte térmico y el eléctrico** en sistemas a escala nanométrica desde una **perspectiva novedosa e intuitiva**.



El transporte de carga en medios moleculares puede describirse imaginando cada **molécula entre dos electrodos** a diferente potencial eléctrico como si estuviera también **en contacto con dos baños térmicos a diferente temperatura  $T$** . Los gradientes de potencial y térmico determinan entonces el transporte. El problema es que estos estudios se basan en modelos fenomenológicos que parametrizan el acople entre el baño y el sistema molecular de un modo que frecuentemente resulta inapropiado. Los acoples electrónicos

que describen el transporte de carga pueden calcularse en términos de la función de onda electrónica, pero no es éste el caso cuando uno aborda el transporte térmico, debido a la **dificultad que hay para definir la densidad de energía térmica y una temperatura local** (que nos daría acceso a la distribución de temperaturas en el dispositivo molecular, una de las grandes incógnitas actuales en la descripción del transporte térmico en nanoestructuras).

Este trabajo aborda el problema (como esquematiza la figura) **introduciendo el concepto de temperatura externa vía el campo de radiación de un cuerpo negro y tratando la transferencia de calor a partir de la interacción de la radiación del cuerpo negro con la materia**, tanto vía excitaciones electrónicas como vibracionales. **El transporte de calor se describe entonces mediante la presencia de un potencial vector** (proveniente de la radiación de cuerpo negro) **en la ecuación de Schrödinger**.

Se consigue así visualizar cómo se alcanza el equilibrio térmico en un material y definir una  $T$  local a través de la **forma espectral del potencial vector total del sistema**. Éste contiene el potencial externo además del generado por el material

como reacción al campo aplicado, esto es, **incluye los fenómenos de polarización eléctrica y térmica**.

La formulación resultante describe tanto el transporte de calor como el de carga inducido por la diferencia de potencial (dc o ac) entre los electrodos, lo que abre la posibilidad de **modelizar a partir de primeros principios el transporte energético en condiciones arbitrarias** de gradientes de  $T$  y para campos electromagnéticos externos de intensidad, frecuencia y duración temporal cualesquiera. Es un **esquema teórico ideal para usar teoría del funcional de la densidad dependiente del tiempo** —formulación exacta de la mecánica cuántica en términos de funcionales de la densidad— que **permitirá estudiar dinámica disipativa, de no-equilibrio, en sistemas nanométricos reales**.