

3. Proyecto Teoría de propiedades electrónicas en la nanoescala

Nombre del Proyecto	Teoría de propiedades electrónicas en la nanoescala			
Titular divulgativo	Cálculos computacionales para el diseño de materiales con propiedades a medida			
Resumen del proyecto (1 frase)	Investigadores de DIPC y CFM se centran en el estudio teórico de las propiedades electrónicas de sistemas nanométricos a partir de cálculos computacionales			
Fecha de comienzo del proyecto	2015	Fecha de fin del proyecto	2020	
Organización líder o coordinadora	Donostia International Physics Center + Centro de Física de Materiales CSIC-UPV/EHU (E. V. Chulkov)			
Otras organizaciones participantes	Organización	Contribución principal al proyecto		
Presupuesto del Proyecto (miles euros)	Año	Presupuesto Total	Participación vasca	
	2016	600k€	200k€	
	2017	600k€	200k€	
	2018	600k€	200k€	
Fuentes de financiación de la participación vasca (miles euros)	Año	Financiación 1	Financiación 2	Otras
	2016	DIPC (100k€)	MPC (100k€)	
	2017	DIPC (100k€)	MPC (100k€)	
	2018	DIPC (100k€)	MPC (100k€)	
Ámbito de actuación	Áreas prioritarias estratégicas <small>Marcar con una X</small>			
	Fabricación Avanzada	Energía	Biosanitaria	
	X	X		
	Territorios de Oportunidad <small>Marcar con una X</small>			
Alimentación	Hábitat Urbano	Ecosistemas	Ind. Cultural y Creativas	
	X	X		
Descripción resumida del Proyecto: principales objetivos y resultados a desarrollar, retos a los que responde, impacto potencial económico y social, etc.				
<p>Los materiales no tienen las mismas propiedades a escala macroscópica (a escala visible) o a nivel atómico o molecular. Un ejemplo que se usa comúnmente para ilustrar esta característica, es el oro, un metal noble por su alta resistencia a la corrosión y a la oxidación, que cuando lo vamos haciendo más pequeño y llegamos a tener solo unos pocos átomos de oro, deja de ser noble y se convierte en un elemento muy reactivo. Este cambio de comportamiento se debe a la emergencia de propiedades con la escala.</p> <p>La nanociencia es precisamente la rama que estudia y manipula la materia a escala nanométrica (sistemas que tienen un tamaño del orden de 10^{-9} m), es decir, la materia a nivel atómico y molecular. Uno de sus grandes objetivos es ser capaces de diseñar sistemas de dimensiones nanométricas, con propiedades a medida (propiedades electrónicas, ópticas,</p>				

magnéticas, geométricas, etc.), y, para ello, es preciso entender esos sistemas y saber cómo construirlos para obtener las propiedades deseadas. Para lograrlo, numerosos grupos de investigación experimentales y teóricos de todo el mundo están trabajando en estrecha colaboración. Los grupos teóricos hacen simulaciones y cálculos numéricos por ordenador de sistemas nanométricos y predicen sus propiedades. Los modelos propuestos se validan o refutan en base a los resultados de los grupos experimentales, y sirven, a su vez, para proponer nuevos materiales o sistemas que se pueden construir experimentalmente y cuyas propiedades han sido deducidas teóricamente.

Gracias al esfuerzo conjunto, se está consiguiendo un enorme avance en la comprensión, el diseño e, incluso, en la construcción de sistemas nanométricos con propiedades a medida, que tienen ya aplicaciones tecnológicas en campos tan importantes como las comunicaciones, la industria microelectrónica, las fuentes alternativas de energía o la nanomedicina. Se trata de una línea de investigación en la que confluyen numerosas disciplinas científicas, que va a aportar infinidad de beneficios sociales y económicos en el futuro.

El proyecto *Teoría de propiedades electrónicas en la nanoescala*, que llevan a cabo investigadores de DIPC y CFM, se centra, como su nombre indica, en el punto de vista teórico. Los investigadores describen las propiedades electrónicas en sistemas de dimensiones nanométricas, a partir de lo que se conoce como cálculos computacionales de *primeros principios*. En este tipo de cálculos, no se hacen aproximaciones usando modelos o tablas de parámetros para simplificar el cálculo. Se tratan todos los átomos, los núcleos y electrones que forman el sistema que se quiere estudiar, con la mayor exactitud posible, asumiendo solo las leyes físicas que rigen el comportamiento de esas partículas. Así, se deduce cómo se van a colocar dichos átomos y se obtienen las propiedades electrónicas del sistema de forma precisa (si van a ser magnéticos o no, si van a ser conductores o no...). Estos cálculos son extremadamente complejos, por lo que cuanto mayor es el sistema a analizar, más difícil y costoso es llevarlos a cabo. En este sentido, los investigadores están obteniendo avances metodológicos relevantes que están permitiendo describir de forma más precisa sistemas nanométricos cada vez más grandes.

Uno de los objetivos del proyecto es proseguir con esos avances metodológicos en los cálculos para que estos sean cada vez más eficientes. El estudio de nuevos materiales con potenciales aplicaciones tecnológicas, tales como el grafeno (un material que consiste básicamente en una lámina de grafito de un único átomo de espesor) o los aislantes topológicos (materiales que se comportan como aislantes en su interior y cuyos electrones solo pueden moverse a lo largo de la superficie del material) tiene especial prioridad.

Gran parte de las investigaciones se realizan en estrecha colaboración con grupos experimentales pioneros de prestigiosas instituciones internacionales, como las Universidades de Marburg, de Dresden y de Göttingen de Alemania o el International Center for Materials Nanoarchitectonics de Japón. Cabe destacar, además, la importancia del polo de investigación de materiales, en particular, en el estudio de las propiedades de estructura electrónica, que forman varios centros de investigación de Donostia.