

3. Nanoeskalako propietate elektronikoen teoria

Proiektuaren izena	Nanoeskalako propietate elektronikoen teoria			
Dibulgazio-izenburua	Materialak neurrirako propietateekin diseinatzeko kalkulu konputazionalak			
Proiektuaren laburpena (esaldi bakarra)	DIPC eta CFMko ikertzaileek sistema nanometrikoen propietate elektronikoen azterketa teorikoa egiten dute, kalkulu konputazionalak abiatuta			
Proiektuaren hasiera-data	2015	Proiektuaren amaiera-data	2020	
Erakunde aitzindaria edo koordinatzailea	Donostia International Physics Center + Materialen Fisika Zentroa CSIC-UPV/EHU (E. V. Chulkov)			
Parte hartzen duten beste erakunde batzuk	Erakundea	Proiektuari egiten dion ekarpen nagusia		
Proiektuaren aurrekontua (mila euro)	Urtea	Aurrekontu osoa	EAeren partaidetza	
	2016	600 k€	200 k€	
	2017	600 k€	200 k€	
	2018	600 k€	200 k€	
EAeren partaidetzaren finantziario-iturriak (mila euro)	Urtea	1 finantziarioa	2 finantziarioa	Bestelakoak
	2016	DIPC (100 k€)	MPC (100 k€)	
	2017	DIPC (100 k€)	MPC (100 k€)	
	2018	DIPC (100 k€)	MPC (100 k€)	
Jarduera-eremua	Leentasuneko eremu estrategikoak <small>Markatu X batez</small>			
	Fabrikazio aurreratua	Energia	Biosanataria	
	X	X		
	Aukera-eremuak <small>Markatu X batez</small>			
	Elikagaigintza	Hiri-habitata	Ekosistemak	Kultura- eta sormen-industriak
	X	X		
Proiektuaren deskribapen laburra: zer helburu nagusi dituen eta zer emaitza espero dituzten, zer erronka dituen, zer eragin ekonomiko eta sozial izan ditzakeen, eta abar.				
<p>Materialek ez dituzte propietate berberak eskala makroskopikoan (eskala ikusgai) edo maila atomiko edo molekularrean. Ezaugarri hori azaltzeko asko erabili ohi den adibide bat da urrearena: urrea metal noblea da korrosioarekiko eta oxidazioarekiko erresistentzia handia baitu; baina urrea txikituz joan ahala, eta urre-atomo gutxi batzuk besterik ez dugunean, noble izateari uzten dio eta elementu oso erreaktibo bihurtzen da. Portaera-aldaketa hori gertatzen da eskalaren araberako propietateak baitituzte materialek.</p> <p>Nanozientzia, hain zuzen ere, materia eskala nanometrikoan aztertzen eta manipulatzeko duen jakintza-arloa da; 10^{-9} m inguruko tamainako sistemak aztertzen ditu, hau da, maila atomikoan</p>				

eta molekularrean. Nanozientziaren helburu handietako bat da dimentsio nanometrikoko sistemak diseinatzeko gai izatera iristea eta, gainera, sistema horien propietateak neurriera prestatzea (propietate elektronikoak, optikoak, magnetikoak, geometrikoak eta abar), eta, horretarako, nahitaez ulertu behar da sistema horiek nolakoak diren eta jakin behar da nola eraiki behar diren, nahi den propietateak izan ditzaten. Helburu horrekin, mundu osoko ikerketa-talde esperimenteral eta teoriko ugari ari dira lankidetzan estuan lanean. Talde teorikoek sistema nanometrikoen simulazioak eta zenbakizko kalkuluak egiten dituzte ordenagailuz, eta sistema horien propietateak aurreratzen. Proposatutako ereduak baliozkotu edo gezurtatu egiten dira talde esperimenteralaren emaitzen arabera, eta, aldi berean, baliagarri dira esperimenteralki eraiki daitezkeen material edo sistema berriak, zeintzuen propietateak teorikoki deduzitu baitira, proposatzeko.

Ahalegin bateratu horri esker, asko aurreratzen ari dira neurrirako propietateak dituzten sistema nanometrikoen ulermenean, diseinuan eta baita haien eraikuntzan ere; izan ere, badituzte, dagoeneko, aplikazio teknologikoak oso arlo garrantzitsuetan, hala nola komunikazioetan, industria mikroelektronikoan, energia-iturri alternatiboetan edo nanomedikuntzan. Jakintza-arlo zientifiko ugari bat egiten duten ikerketa-lerro bat da hau, eta ezin konta ahala onura sozial eta ekonomiko ekarriko ditu etorkizunean.

Nanoeskalako propietate elektronikoaren teoria proiektuan, proiektuaren izenak berak dioen bezala, ikuspegi teorikoa ari dira lantzen DIPC eta CFMko ikertzaileak. Ikertzaileek dimentsio nanometrikoko sistemen propietate elektronikoak deskribatzen dituzte, *lehen printzipioen arabera* kalkulu konputazional esaten zaienetik abiatuta. Kalkulu-mota horietan, ez dira hurbilketak egiten ereduak edo parametro-taulak erabiliz, kalkuluak sinpletzeko. Ikertu nahi den sistema osatzen duten atomo, nukleo eta elektroien guztiak tratatzen dira, ahalik eta zehaztasunik handienarekin, partikula horien portaera gidatzen duten lege fisikoak bakarrik kontuan hartuta. Hala, deduzitzen da atomoak nola ipiniko diren, eta sistemaren propietate elektronikoak lortzen dira zehaztasun handiz (hau da, magnetikoak izango diren edo ez, eroaleak izango diren edo ez...). Kalkulu horiek oso konplexuak dira; beraz, zenbat eta handiagoa izan analizatu nahi den sistema, zailagoa eta garestiagoa da kalkuluak egitea. Nolanahi ere, ikertzaileak aurrerapen metodologiko garrantzitsuak ari dira lortzen, eta, haiei esker, gero eta sistema nanometrikoko handiagoak ari dira deskribatzen zehaztasun handiagoarekin.

Proiektuaren helburuetako bat da kalkulu horiek egiteko aurrerapen metodologikoekin jarraitzea, gero eta kalkulu eraginkorrago egiteko. Lehentasun handia ematen zaio aplikazio teknologiko ahaltsuak izan ditzaketen material berrien ikerketari, adibidez: grafenoa (funtsean, atomo bakar bateko lodierako grafito-geruza batez osatutako materiala) edo isolatzaile topologikoak (barnetik isolatzaile gisa jokatzen duten materialak, zeintzuen elektroien materialaren gainazaletik baino ezin baitira higitu).

Ikerketa gehienak nazioarteko erakunde ezagunetako talde esperimenteral aitzindariekin lankidetzan egiten dira, adibidez: Marburg, Dresden eta Göttingengo unibertsitateak (Alemania) eta International Center for Materials Nanoarchitectonics (Japonia). Aipatu beharrekoa da, halaber, materialen ikerketaren poloak, Donostiako hainbat ikerketa-zentrok osatuak, bereziki, egitura elektronikoaren propietateen azterketan duen garrantzia.