

ciencia y tecnología zientzia eta teknologia

Propiedades **electrónicas y mecánicas** de nuevas **nanoestructuras**

Eskala nanometrikoan dispositibo berrien bila ibili dira, aplikazio optoelektronikoetan argi urdina edota ultramorearen igoerri ahal izateko. Horren ondorioz, eskala nanometrikoak sistemak garrantzi handia hartu dute azken urteetan. Egindako ikerketen emaitzek egunerokotasun handiko ondorioak dituzte aplikazio nanoelektronikoetan, fotonikan eta aplikazio biomedikoetarako materialetan.

PARA MÁS INFORMACIÓN:
Prof. Ángel Rubio
Dpto. Física de Materiales
e-mail: angel.rubio@ehu.es

La búsqueda de nuevos dispositivos a escala nanométrica que puedan emitir luz en el azul y/o ultravioleta, para aplicaciones optoelectrónicas ha hecho que sistemas a escala nanométrica basados en el **nitruro de boro (BN)** hayan adquirido una gran relevancia en los últimos años, en combinación con nanoestructuras de carbono. Además de sus excelentes propiedades electrónicas y mecánicas (de alta resistencia) estos materiales se caracterizan por el hecho de que forman estructuras macroscópicas (sólidos moleculares nanoestructurados) mediante interacciones débiles, tipo *van der Waals*, que son fundamentales en otros campos del saber, en particular la biología y la química supramolecular, donde el autoensamblado molecular viene dictado por este tipo de interacciones (*van der Waals*, puentes de Hidrógeno, etc).

Por lo tanto es importantísimo profundizar en la investigación de estas fuerzas de interacción débiles y de las propiedades electrónicas y mecánicas de nuevas estructuras nanoestructuradas basadas en estos enlaces.

En estas líneas de investigación se enmarcan los recientes trabajos publicados por el grupo de Física de Materiales liderado por el **PROF. ÁNGEL RUBIO DE LA UPV/EHU, ETSF Y CENTRO-MIXTO CSIC-UPV/EHU** en la prestigiosa revista *Physical*

Review Letters. En estos artículos se ha caracterizado la estabilidad de las estructuras laminares de BN, incluyendo fuerzas de dispersión [1] y la absorción y emisión de luz de estas nanoestructuras [2]. La posible aplicaciones de estas nanoestructuras en dispositivos a escala nanométrica viene determinada por procesos de disipación relacionados con defectos, acoplo con vibraciones de la red, etc. A pesar de su relevancia en la literatura había descripciones contradictorias sobre los modos de vibración del BN. En un último trabajo del grupo, recientemente publicado [3], se ha realizado un estudio detallado experimental y teórico, resolviendo una controversia existente hasta la fecha: se ha discernido como las vibraciones se ven modificadas por la interacción entre en BN y la superficie y como la teoría es capaz de describir la interacción débil entre láminas.

Los resultados ponen en evidencia, una vez mas, el carácter predictivo de las técnicas de simulación de primeros principios basadas en la teoría del funcional de la densidad estática y dependiente del tiempo para sistemas a escala nanométrica con interacciones tanto covalentes como *van der Waals*. Los resultados tienen implicaciones más generales para otros compuestos de Carbono, como los

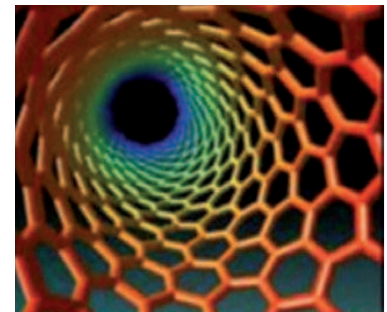
nanotubos, grafeno, etc...que son de gran actualidad para aplicaciones en nanoelectrónica, fotónica y materiales para aplicaciones biomédicas.

Estos resultados constituyen uno de los motivos de la concesión del Premio DuPont 2007 de Ciencia al **PROF. ÁNGEL RUBIO**.

[1] *First-Principle Description of Correlation Effects in Layered Materials* A. Marini, P. García-González and A. Rubio *Physical Review Letters* 96, 136404 -4 (2006)

[2] *Excitons in boron nitride nanotubes: dimensionality effects* L. Wirtz, A. Marini and A. Rubio *Physical Review Letters* 96, 126104 -4 (2006)

[3] *Vibrational properties of Hexagonal Boron Nitride: Inelastic X-ray Scattering and ab initio Calculations* J. Serrano, A. Bosak, R. Arenal, M. Krisch, K. Watanabe, T. Taniguchi, H. Kanda, A. Rubio and L. Wirtz *Physical Review Letters* , 98 , no9 (2007)



matrize organikodun nanokonpositeak nanoteknologian

Las aportaciones de los **nanomateriales a la Nanotecnología se basan en su estado de nanoestructuración o en la combinación de matrices poliméricas con nanoentidades (para refuerzo o conducta específica). Las propiedades finales de estos nuevos materiales son función de la matriz, el nano-refuerzo empleado (diversos tipos) y la interfase generada entre ambos durante su generación.**

Nanotecnología, nanomaterialean ikuspegitik, nanoegituren edo/eta nanokonpositeen diseinuan, fabrikazioan eta aplikazioen garapenean oinarritzen da. Aplikazioak arlo ezberdinetan zabaltzen ari dira egunez egun. Arlo honetan, materiale nanoegituratuak eta nanoerrefortzua duten konpositeak bereizten dira. Errefortzuak 1-100 nm tarteko tamainakoak dira. Hiru moztetakoak aurki daitezke 1-D (nanozuntzak), 2-D (nanoxafalak) eta 3-D (nanoesferak eta beste itxurakoak).