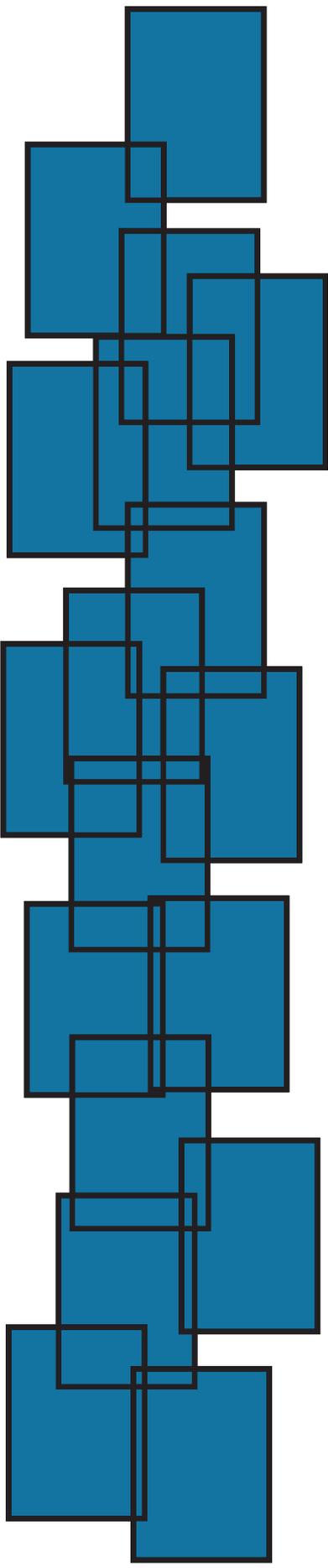
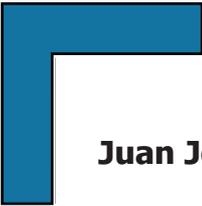


TEORÍA, MODELADO Y SIMULACIÓN EN NANOCIENCIA





Juan José Sáenz

Lugar y fecha de nacimiento: Madrid (España), 8 de octubre de 1960

Formación: Licenciado en Físicas por la Universidad Autónoma de Madrid (UAM) en 1982. Doctor en Ciencias Físicas por la UAM en 1987.

Carrera Profesional: Juan José Sáenz es Catedrático del Departamento de Física de la Materia Condensada de la UAM. Desde 1993 dirige el grupo de investigación "Moviendo Luz y Electrones" (MoLE) en la UAM. Actualmente su trabajo de investigación incluye estudios teóricos y modelización de microscopías de proximidad (SPM), transporte cuántico de electrones en nanocontactos, transporte de ondas a través de medios complejos y nanofotónica. Ha publicado alrededor de 100 artículos en revistas internacionales de reconocido prestigio (destacando los 23 trabajos en la revista Physical Review Letters). Es coorganizador de la serie de conferencias internacionales "Trends in Nanotechnology" (TNT).



1. Introducción

Las futuras aplicaciones de la Nanotecnología requieren un conocimiento profundo de los aspectos teóricos y computacionales de todo tipo de materiales y dispositivos a escala nanométrica. Numerosas áreas emergentes, tales como la Electrónica Molecular, Nanobiotecnología, Nanofotónica, Nanoflúidica o la Computación Cuántica van a dar lugar, a corto o medio plazo, al desarrollo de nuevos elementos de dispositivos basados en Nanotecnología. La simulación teórica del comportamiento de estos dispositivos esta siendo cada vez más importante ya que nos permitirá i) comprender las propiedades físicas y químicas involucradas, ii) visualizar lo que ocurre dentro del dispositivo y iii) optimizar el funcionamiento y la fabricación de éstos.

La descripción teórica y el modelado de los nuevos nanodispositivos y los diversos fenómenos que ocurren en sistemas nanométricos involucra, en la mayor parte de las ocasiones, conceptos, técnicas de cálculo, programas y códigos informáticos y aproximaciones teóricas que provienen de campos muy diversos (Física de la Materia Condensada, Química computacional, Biofísica, Matemáticas, Óptica, Ingeniería, etc.). Problemas que hasta hace unos pocos años no guardaban mucha relación, acaban por estar relacionados de una manera fundamental en el mundo de la Nanotecnología. El modelado y la simulación de procesos es esencial para la integración entre las escalas atómica y molecular, típicas de la Nanociencia, con el mundo micro, meso y macroscópico. El apoyo a la investigación y desarrollo de este campo es, por tanto, fundamental para el desarrollo de las aplicaciones industriales basadas en la Nanociencia.

2. Estado del arte

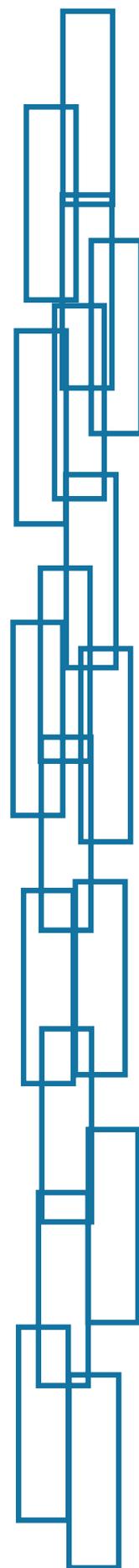
En los últimos 20 años, las técnicas fundamentales de teoría, modelado y simulación han sufrido una revolución comparable a la de los avances tecnológicos y experimentales que han dado lugar al desarrollo de la Nanociencia. Durante este periodo, hemos visto el avance espectacular de los algoritmos de cálculo de estructura electrónica basados en el funcional de la densidad, dinámica molecular "ab-initio", métodos Monte Carlo clásicos y cuánticos, métodos de "meso-escala" en materia blanda (soft matter) y algoritmos ultrarrápidos de multipolos y mayado múltiple (multipole, multigrad). La combinación de estos métodos teóricos con la creciente potencia de cálculo de los nuevos ordenadores ha hecho posible la simulación de sistemas con millones de grados de libertad.

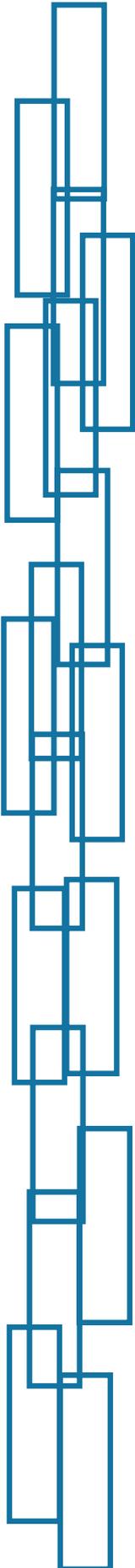
Podríamos distinguir tres grandes áreas de trabajo donde se pueden identificar tanto los avances como retos fundamentales con los que se enfrenta la teoría, modelado y simulación en Nanociencia:¹

1. Las unidades estructurales más básicas: Nanotubos, Nanohilos, puntos cuánticos, agregados atómicos y moleculares, nanopartículas, etc.

¹ Theory and Modelling in Nanoscience, Report of the May 10–11, 2002, Workshop Conducted by the Basic Energy Sciences and Advanced Scientific Computing Advisory Committees to the Office of Science, Department of Energy, USA.

Control and System Integration of Micro and Nano-Scale Systems, Report from the National Science Foundation workshop March 29–30, 2004.





El estudio de estos sistemas básicos, accesible con los métodos actuales, tendrá (tiene) un impacto inmediato tecnológico en distintas áreas:

- Transporte en nanoestructuras: Dispositivos electrónicos
 - Propiedades ópticas a escala nanométrica: Dispositivos optoelectrónicos
 - Coherencia y decoherencia cuántica: Computación cuántica
 - Interfases entre materia “dura” y “blanda”: Biosensores
 - Espintrónica: Tecnologías de la información
2. Nanoestructuras complejas, nano-interfases y nano-intercaras.
 3. Ensamblado y crecimiento de nanoestructuras.

3. Teoría, modelado y simulación en Nanociencia en España

Dentro de la investigación en nanociencia en España destacan de manera preeminente los trabajos relacionados con el modelado y la simulación. Una lista de los distintos grupos involucrados se puede encontrar en la página web de la iniciativa española M4nano (<http://www.m4nano.com> con más de 130 grupos de trabajo en este campo). Los trabajos teóricos (a un alto nivel internacional) abarcan distintas áreas y campos entre los cuales destacan los relacionados con:

- Nanotubos y fullerenos
- Nanohilos y nanocontactos
- Nanopartículas y agregados atómicos y moleculares
- Puntos cuánticos
- Propiedades de materiales nanoestructurados y composites
- Autoensamblado
- Coloides
- Transporte eléctrico
- Dispositivos electrónicos
- Propiedades de sistemas complejos y Caos
- Nanofotónica, óptica y electrodinámica a escala nanométrica
- Plasmónica
- Nanocélulas solares
- Termodinámica y estadística de nanosistemas
- Nanomagnetismo
- Biología estructural y biocomputación
- Plegamiento de proteínas
- Biosensores
- Microscopía tunel y de fuerzas atómicas
- Adsorción en superficies
- Propiedades y dinámica de procesos en superficies
- Nanofluidos
- Catálisis
- ...

Entre todos los grupos y proyectos de investigación, destaca la iniciativa española SIESTA (Spanish Initiative for Electronic Simulations with Thousands of Atoms <http://www.uam.es/departamentos/ciencias/fismateriac/siesta>) por su enorme repercusión a nivel internacional. SIESTA es tanto un método como su implementación en un programa de cálculo y permite calcular, no sólo la estructura electrónica, sino

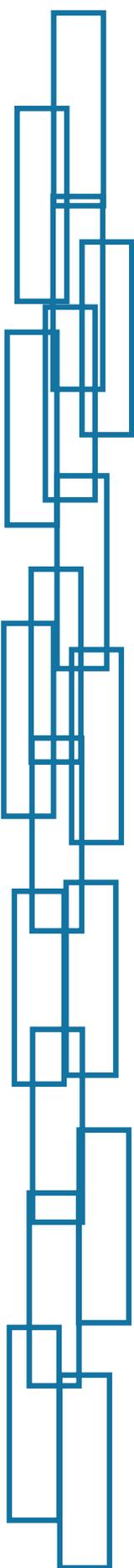
también realizar simulaciones “ab-initio” de dinámica molecular de sólidos y moléculas con miles de átomos. SIESTA ha revolucionado el mundo de la simulación y se ha convertido en un estándar mundial dentro de los cálculos de “primeros principios”.

Comparación de imágenes experimentales de microscopía de efecto túnel de la superficie Si (111) 7x7 (paneles inferiores) tomadas a diferentes voltajes (paneles superiores), con simulaciones realizadas utilizando SIESTA. [Cortesía de O. Paz, I. Brihuega, J. M. Gómez-Rodríguez y J. M. Soler. Imagen publicada en Physical Review Letters 94, 056103 (2005)].

Proyectos

Los proyectos de investigación relacionados con el modelado y la simulación en nanociencia están distribuidos en prácticamente todas las convocatorias públicas de investigación y desarrollo. Es difícil encontrar un gran proyecto en el que uno de los tópicos prioritarios no sea el que nos ocupa. En particular, esto ocurre en los proyectos asociados a la iniciativa **Ingenio 2010**. Una búsqueda entre los Proyectos de distintos Planes Nacionales de Investigación del año 2007 así como en la Acción Estratégica de Nanociencia y Nanotecnología <http://www.creade.org/ciencia/proyectos> nos puede dar una idea de la relevancia de la investigación teórica en el mundo nano:

- **MAT2007-60966**: Simulación de primeros principios de Nanomateriales.
- **MAT2007-65711-C04-04**: Modelización y caracterización de sistemas microporosos.
- **MAT2007-65778-C02-02**: Modelización molecular, estudio espectroscópico y fotofísica de colorantes láser en la región azul y roja en diversos medios.
- **MAT2007-65990-C03-03**: Diseño, estudio y caracterización de materiales y Nanomateriales de interés tecnológico bajo condiciones extremas de presión y temperatura: modelización y caracterización desde primeros principios.
- **MAT2007-66719-C03-02**: Dinámica y electrónica de Espin en nanomateriales: estructuras epitaxiales crecidas por M.B.E. y modelización.
- **CTQ2007-60102**: Tratamiento teórico de la reactividad química. Simulación de reacciones usando potenciales Ab Initio y métodos DM/MM.
- **CTQ2007-60529**: Aproximación multidisciplinar al descubrimiento de antagonistas de los receptores de ADENOSINA: química combinatoria, cribado farmacológico de alta eficacia y modelización molecular.

- 
- [CTQ2007-62122](#): Modelación bioquímica y biofísica y biofísica en hemoproteínas. Estudios de transferencia electrónica y cooperatividad.
 - [CTQ2007-63266](#): Modelización molecular de la ruptura selectiva de péptidos lineales y con estructura triple hélice: catálisis por compuestos organometálicos y metalo-proteinasas.
 - [CTQ2007-65112](#): Modelación y diseño molecular de uniones de tres nanotubos grafiticos para su aplicación como transistores.
 - [CTQ2007-65800](#): Avances en el cálculo del equilibrio entre fases: desarrollo de nuevos modelos y métodos de cálculo más capaces para sistemas complejos.
 - [BIO2007-62954](#): Biología computacional de polipéptidos: simulación de procesos de plegamiento y análisis de interacciones polipéptido-MHC II.
 - [BIO2007-63917](#): Modelizaciones computacionales para el estudio de redes de regulación de genes. Mecanismos estocásticos y retardos temporales.
 - [BIO2007-66670](#): Modelado por homología de interacciones entre proteínas y pequeñas moléculas.
 - [BIO2007-67011-C02-02](#): Modelos computacionales de redes biomoleculares.
 - [SAF2007-67008-C02-02](#): Aplicación de la simulación computacional en la identificación de nuevas dianas terapéuticas y en el diseño de fármacos.
 - [FIS2007-60064](#): Modelización computacional de sistemas no ligados en física atómica y molecular. Ionización y disociación por pulsos láser, partículas cargadas y superficies.
 - [FIS2007-60158](#): Estadística de la luz difundida por nanopartículas metálicas en suspensión. Influencia de resonancias plasmónicas y difusión múltiple. Desarrollo de técnicas para obtener información del difusor.
 - [FIS2007-61566](#): Estudio de procesos de electrodifusión-adsorción de membranas mediante el método de simulación por redes.
 - [FIS2007-62633](#): Caracterización y optimización, mediante simulación MD, de nanoestructuras formadas por clusters metálicos depositados sobre sustratos inertes.
 - [NAN2004-09125-C07-06](#): Nanopartículas magnéticas biocompatibles: de la modelización de sus propiedades a las aplicaciones.
 - [NAN2004-08843-C05-05](#): Teoría de materiales jerarquizados para nanofotónica.

En esta lista únicamente se han incluido aquellos proyectos cuyo título incluye alguna de las palabras clave (teoría, simulación, modelado o "modelización"). Un análisis sistemático de la totalidad de los proyectos está fuera del alcance de este

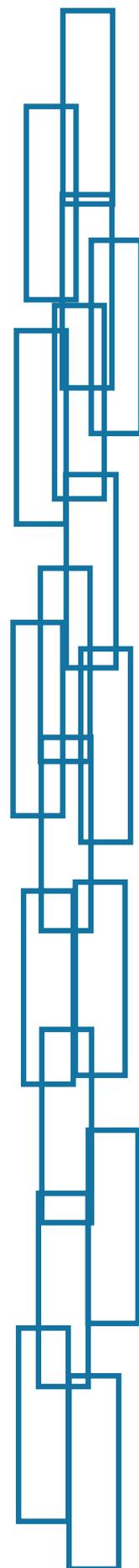
informe. Es interesante resaltar la utilización de las mismas técnicas de cálculo y simulaciones en áreas muy diversas dentro de la Nanociencia (Materiales, Física, Biotecnología, Química, etc.).

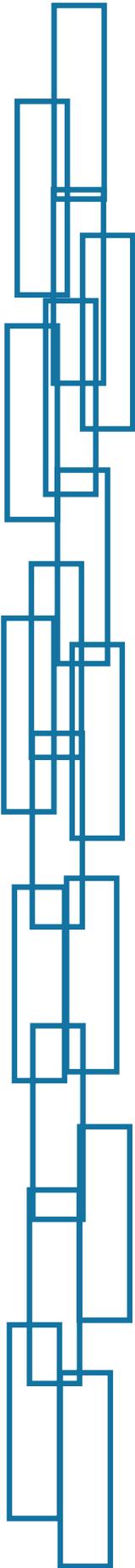
Publicaciones españolas más relevantes en el área (2004-2007)

Entre los artículos más citados publicados en este periodo por grupos españoles (según el ISI Web of Knowledge)², se pueden destacar los siguientes trabajos relacionados con teoría, modelado y simulación en Nanociencia:

- Boccaletti S., Latora V., Moreno Y., Chavez M., Hwang D. U. Complex networks: Structure and dynamics. *Physics Reports-Review Section of Physics Letters* 424 (4-5): 175-308 FEB 2006.
- Peres N. M. R., Guinea F., Neto A. H. C. Electronic properties of disordered two-dimensional carbon. *Physical Review B* 73 (12): Art. No. 125411 MAR 2006.
- Pendry J. B., Martín-Moreno L., Garcia-Vidal F. J. Mimicking surface plasmons with structured surfaces. *SCIENCE* 305 (5685): 847-848 AUG 6 2004.
- Lopez N., Janssens T. V. W., Clausen B. S., Xu Y., Mavrikakis M., Bligaard T., Norskov J. K. On the origin of the catalytic activity of gold nanoparticles for low-temperature CO oxidation. *Journal of Catalysis* 223 (1): 232-235 APR 1 2004.
- Nogues J., Sort J., Langlais V., Skumryev V., Surinach S., Munoz J. S., Baro M. D. Exchange bias in nanostructures. *Physics Reports-Review Section of Physics Letters* 422 (3): 65-117 DEC 2005.
- Fernández-García M., Martínez-Arias A., Hanson J. C., Rodriguez J.A. Nanostructured oxides in chemistry: Characterization and properties. *Chemical Reviews* 104 (9): 4063-4104 SEP 2004.
- Platero G., Aguado R. Photon-assisted transport in semiconductor nanostructures. *Physics Reports-Review Section of Physics Letters* 395 (1-2): 1-157 MAY 2004.
- Acebron J. A, Bonilla L. L., Vicente C. J. P., Ritort F., Spigler R. The Kuramoto model: A simple paradigm for synchronization phenomena. *Reviews of Modern Physics* 77 (1): 137-185 JAN 2005.
- Malomed B. A., Mihalache D., Wise F., Torner L. Spatiotemporal optical solitons. *Journal of Optics B-Quantum and Semiclassical Optics* 7 (5): R53-R72 MAY 2005.

² Referencias obtenidas del ISI Web of Knowledge mediante búsqueda "on-line" entre los artículos con más de 40 citas publicados entre "2004-2007" (Publication year) tales que la dirección de alguno de los autores contiene "SPAIN" (Address). La búsqueda se ha completado utilizando como palabras clave (topic): "nano* and simulation", "nano* and theory"



- 
- Fu C. C., Willaime F., Ordejon P. Stability and mobility of mono- and di-interstitials in alpha-Fe. *Physical Review Letters* 92 (17): Art. No. 175503 APR 30 2004.
 - Rocha A. R., Garcia-Suarez V. M., Bailey S. W., Lambert C. J., Ferrer J., Sanvito S. Towards molecular spintronics. *Nature Materials* 4 (4): 335-339 APR 2005.
 - Fernandez E. M., Soler J. M., Garzon I. L., Balbas L. C. Trends in the structure and bonding of noble metal clusters. *Physical Review B* 70 (16): Art. No. 165403 OCT 2004.
 - Bustamante C., Liphardt J., Ritort F. The nonequilibrium thermodynamics of small systems. *PHYSICS TODAY* 58 (7): 43-48 JUL 2005.
 - Bisquert J., Cahen D., Hodes G., Ruhle S., Zaban A. Physical chemical principles of photovoltaic conversion with nanoparticulate, mesoporous dye-sensitized solar cells. *Journal of Physical Chemistry B* 108 (24): 8106-8118 JUN 17 2004.
 - Lopez N., Norskov J. K., Janssens T. V. W, Carlsson A., Puig-Molina A., Clausen B. S., Grunwaldt J. D. The adsorption and shape of nanosized Au particles in a Au/TiO₂ catalyst. *Journal of Catalysis* 225 (1): 86-94 JUL 1 2004.
 - Dubbeldam D., Calero S., Vlugt T. J. H., Krishna R., Maesen T. L. M., Smit B. United atom force field for alkanes in nanoporous materials. *Journal of Physical Chemistry B* 108 (33): 12301-12313 AUG 19 2004.
 - Gomez-Navarro C., De Pablo P. J., Gomez-Herrero J., Biel B., Garcia-Vidal F. J., Rubio A., Flores F. Tuning the conductance of single-walled carbon nanotubes by ion irradiation in the Anderson localization regime. *Nature Materials* 4 (7): 534-539 JUL 2005.
 - Bratkovsky A. M, Levanyuk A. P. Smearing of phase transition due to a surface effect or a bulk inhomogeneity in ferroelectric nanostructures. *Physical Review Letters* 94 (10): Art. No. 107601 MAR 18 2005.

4. Iniciativas relevantes

Plataformas Tecnológicas Europeas

La relevancia de la investigación teórica, modelado y simulación dentro de la estrategia europea se manifiesta en las prioridades de las distintas Plataformas Tecnológicas Europeas

http://cordis.europa.eu/technology-platforms/individual_en.html

Un aspecto particularmente importante de esta investigación es que concierne a prácticamente todas las áreas donde los nanomateriales y nanoprosos juegan un papel clave: Aeronáutica, Espacio, Energía, Transporte, Electrónica y Biomedicina. El desarrollo de nuevo "software" de simulación y modelado juega también un rol

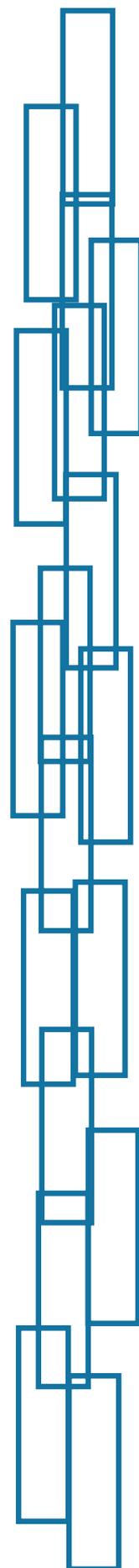
importante en la evolución de las áreas de Computación, Información y Comunicación (IST).

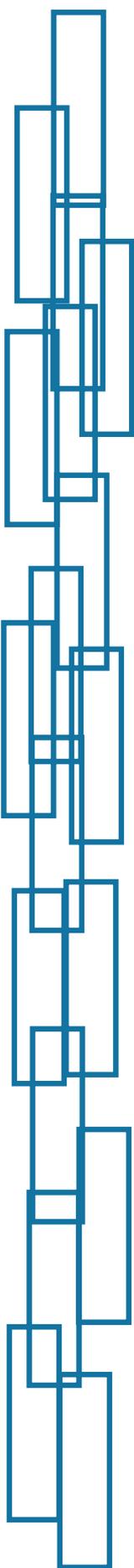
Dentro de las agendas estratégicas de investigación (Strategic Research Agenda) de plataformas europeas, EuMaT (European Technology Platform for Advanced Engineering Materials and Technologies) y ENIAC (European Nanoelectronics Initiative Advisory Council) destacan por el énfasis en los aspectos de simulación y modelado. Dentro de los cinco tópicos prioritarios seleccionados por EuMaT, figuran el modelado de materiales (Materials modeling) y el desarrollo de modelado "multi-escala" (multi-scale modeling). EuMaT pone especial énfasis en el modelado y diseño de herramientas para nano-objetos complejos, e.j. nanopartículas con diferentes recubrimientos, nanohilos de multicapa, etc. Dado que las propiedades de la materia cambian a escala nanométrica se propone estudiar especialmente los fenómenos que ocurren en las intercaras de los nano-objetos constituyentes de nuevos materiales nanoestructurados.

El análisis realizado por ENIAC de los sistemas electrónicos muestra que las fronteras tecnológicas entre los dispositivos semiconductores, empaquetamiento y tecnología de sistemas desaparecerán en un futuro cercano. No será posible diseñar dispositivos y tecnologías sin tener en cuenta el diseño de los chips y sus nano-constituyentes. Esto implica necesariamente un análisis y optimización de numerosos parámetros que solo puede ser realizado mediante un modelado y simulación que abarque distintas escalas. De hecho, en EuMaT, el modelado a "multi-escala" y la simulación teórica se consideran temas horizontales relacionados con todos los puntos clave relacionados con la plataforma (Knowledge-based Multifunctional Materials, Materials for Extreme Environments, Hybrid & MultiMaterials). La propuesta de "Integrated Multiscale Collaborative Frameworks" permite, por primera vez, tener en cuenta dentro de un contexto unificado, todos los fenómenos relevantes en el diseño de materiales, el procesado y las posibles aplicaciones, abarcando desde la escala atómica y molecular hasta la escala tradicional de la ingeniería.

Iniciativa M4nano

"Modelado para la Nanotecnología ["Modeling for Nanotechnology" (M4nano)] es una iniciativa liderada por cuatro instituciones españolas: Universidad Autónoma de Madrid (UAM), Parque Científico de Madrid (PCM), Universidad Complutense y la Fundación Phantoms, con el objetivo de mantener un flujo sistemático de información entre grupos de investigación y, de esta manera, evitar la fragmentación de esfuerzos en las investigaciones relacionadas con la Nanotecnología. M4nano pretende ser la primera fuente de referencia en España y en Europa en el campo de la Nanotecnología cubriendo todos los tópicos que tienen relación con la teoría, modelado, diseño y simulaciones de materiales nanoestructurados, computación cuántica, química, física y biología computacional, nanomecánica, nanomáquinas, naoelectrónica, nanoprosos, nanomagnetismo, nanoóptica, nanomedicina, nanobiotecnología etc. Esta iniciativa, basada en internet permitirá obtener una visión general del estado del arte del modelling en Nanotecnología y de los últimos avances y actividades. M4nano, en estrecha colaboración con otras instituciones Españolas y Europeas involucradas en la investigación y desarrollo nanotecnológicos, pretende desarrollar distintas herramientas de trabajo como una base de datos sobre técnicas, grupos de investigación dedicados a la modelización en Nanotecnología, un Forum para estimular la discusión y colaboración entre grupos, una fuente de documentación (cursos, seminarios, resúmenes,...), etc. A medio plazo se pretende implementar un "HUB" computacional que sirva como repositorio de códigos de simulación para





modelización y diseño de nano-dispositivos. En relación con este último punto, se establecerán colaboraciones y acuerdos con iniciativas similares como "NanoHUB" de la NSF en los Estados Unidos (<http://www.nanohub.org>) o la Icode en Italia (<http://www.i-code.it/index.htm>).

5. Actuaciones a desarrollar en España en el plazo 2008-2011

Las simulaciones realmente interesantes en Nanociencia y Nanotecnología involucran escalas múltiples de tiempo y de longitud así como la combinación de materiales y moléculas que se han estudiado tradicionalmente en distintas disciplinas. Esto implica el desarrollo de nuevos métodos y la combinación de métodos teóricos desarrollados en distintos contextos. Por este motivo es esencial facilitar la colaboración y la formación de grupos interdisciplinares de investigadores teóricos, computacionales, matemáticos aplicados e informáticos.

En paralelo a las Agendas Estratégicas de Investigación propuestas por las Plataformas Europeas, sería necesario considerar el modelado a "multi-escala" y la simulación teórica como tema "transversal" relacionado con multitud de conexiones con las diferentes iniciativas públicas y Planes de Investigación. Siguiendo el modelo europeo, se deberían tener en cuenta, dentro de un contexto unificado, todos los métodos teóricos y de simulación relevantes, en el diseño de materiales, el procesado y las posibles aplicaciones, abarcando desde la escala atómica y molecular hasta la escala tradicional de la ingeniería.

Todos los análisis relacionados con el impacto y la evolución de la nanotecnología coinciden en resaltar la relevancia del modelado y la simulación numérica. Sin embargo, la diversidad de técnicas y los diferentes puntos de vista con que se abordan problemas relacionados, hace que exista una gran fragmentación del conocimiento teórico acumulado en esta nueva rama de la Ciencia. Sería interesante estudiar con detalle la creación de la Red para la Computación en Nanotecnología (Network for Computational Nanotechnology <http://www.nanohub.org>) llevada a cabo en Purdue (EE.UU.) financiada por la NSF. Ésta red integra distintas disciplinas, expertos y diferentes áreas de aplicación alrededor de los mismos principios y herramientas específicas de la nanoescala. La parte visible de la red es el NanoHUB: un portal libre de Internet que ofrece herramientas de simulación "on-line", donde se puede consultar y compartir información "nano" (cursos, seminarios, informes sobre códigos y herramientas computacionales, etc.). El "NanoHUB" ha demostrado ser una herramienta extremadamente útil tanto para la investigación como para la enseñanza. El portal permitiría, tanto a estudiantes como profesores, acceder a recursos computacionales a los que difícilmente tendrían acceso en sus ordenadores personales.

6. Conclusiones

Los avances en teoría, modelado y simulación que hemos vivido en España durante los últimos años se pueden calificar de espectaculares. La relevancia de la simulación y el modelado en Nanociencia se manifiesta en su impacto en cada uno de los programas y actuaciones específicas en Nanotecnología. Como conclusión más relevante del análisis efectuado, destaca la necesidad de encontrar alguna herramienta o algún marco de trabajo que permita aglutinar, coordinar y optimizar el excelente trabajo que se realiza en distintas áreas. Por otra parte, la distancia cada vez más corta entre la investigación básica y las aplicaciones tecnológicas y la relevancia de los

modelos teóricos en este rápido desarrollo (un ejemplo actual lo encontramos en las industrias farmacéuticas y el diseño y optimización teórica de nuevos fármacos) hacen necesario un consenso sobre nuevos estándares en modelado y simulación. Dada la tradición y el alto nivel de la investigación “teórica” en España, una acción transversal específica no sólo sería extremadamente útil para optimizar y coordinar recursos locales sino que podría liderar el desarrollo del modelado y la simulación en Nanociencia en Europa.

