

CIC nanoGUNEK *Simune* martxan jartzen du, enpresei zuzendutako eskala atomikorako simulazio zerbitzua

* ***Simunek* enpresei arazo teknologikoak konpontzen lagunduko die denbora eta kostuak aurreztuz**

* **nanoGUNEko Teoriako taldeak zerbitzuaren ardura izango du eta hasera batean energia eta elektronika sektoreetara zuzenduko da**

CIC nanoGUNEK erakunde eta enpresa desberdinek burutzen dituzten I+G prozesuetan laguntzeko asmoz, *Simune* izena daraman zerbitzu berria martxan jarri du. Zerbitzu honek materialak eskala atomikoan duen jokoera ezagutzeko simulazioak burutuko ditu, arazo teknologiko zehatzak konpontzen lagunduz eta, bide batez, inbertsioa ere gutxituz.

Kanpoko zientzilarien partaidetzarekin batera nanoGUNEK martxan jartzen duen zerbitzuak, **hainbat sektoreentzat simulazio baliagarriak** eskaintzen ditu. Dena den, hasera batean behintzat, energia eta elektronika sektoreetan jarduera ildoan duten enpresetan fokaturiko da. Ester Sola zerbitzuaren arduradunak aipatzen duen bezala “*fisika kuantikoaren printzipioetan oinarrituz eta superordenagailuak erabiliz solidoen, likidoen eta nanoegituren simulazioak burutuko ditugu*”. Solaren iritziak, “*horrelako kalkuluen bitartez osagai jakin batek datozen urteetan zein nolako garapena izan dezakeen aurrekusi dezakegu edota materiale baten ezaugarriak aztertu, fisikoki ekoiztu aurretik haren errentagarritasuna baloratu ahal izateko*”. Horrela *Simune*-ren bitartez, denbora tarte luzeetan hondakin nuklearren garapena aurreikustea, atmosferan CO₂ ren murriztapenerako mekanismo berriak ebaluatu edota, ekoiztu aurretik, material baten eraginkortasuna neurtzea bideragarria izan daiteke.

Zerbitzu hau **nanoGUNEK sustatua izan da, Emilio Artachoren eta konputazio simulazioetan adituak diren beste hiru ikerlarien partaidetzaren bitartez: Pablo Ordejón** (ICN2-Kataluniako nanozientzia eta nanoteknologi Institutoa), **José María Soler** (Madrilgo Unibertsitate Autonomoa) eta **Juan José Palacios** (Madrilgo Unibertsitate Autonomoa). Aurreko hirurak (Artacho, Ordejón eta Soler) “SIESTA” kodearen, nazioarte mailan oihartzun handia lortu zuen software konputazionalaren koautoreak dira eta, bere aldetik, Juan José Palacios “ANT” kodearen koautorea da.

Enpresa esparruan sortzen diren egoera eta kasuistika desberdinak konpontze aldera, nanoGUNEko ikerlariak kode hauek eta baita bestelakoak ere erabiliko dituzte. Zerbitzu honetan atxikitzen den Teoriako taldeko liderra eta Ikerbasque ikerlari den Emilio Artachok adierazten duen bezala “*enpresen lehiakortasuna bultzatzeko asmoz, konponbideak lortzea eta eskaintzea espero dugu, horretarako, alde batetik, zerbitzu honen ardura duten ikerlarien ezagutzak eta eskarmentuak eta, bestetik, nanoGUNEko ekipamenduak eta azpiegiturak uztartu eta bateratuko ditugu*”.

Era berean, nanoGUNEko Zuzendari Orokorra den **José María Pitarkek**, “*zerbitzu berri honek nanoGUNEK Euskal Herriko lehiakortasuna sustatzeko duen konpromisoari erantzuten diola*” azpimarratu du, “*enpresetan (pymeak, korporazioak, clusterrak...) gure zentroko ikerketa talde desberdinek sortzen duten ezagutza txertatzea eta barneratzea ahalbideratuz*”. Beraz, zerbitzu berriaren ardura duten ikerlarien ezagutzak eta esperientziak, **enpresa ehunari laguntza eskaintzea ahalbideratzen du**. Horretarako web gune bat ere martxan jarri da: **simune.nanogune.eu**



Teoria praktikara iristeko

nanoGUNEko Teoriako taldea, Emilio Artachoren gidaritzapean 2011etik abian jarria, 7 ikerlariez osatzen da eta denbora joan ahala zabalduz jarraitzen du. Ekipamenduari dagokionez, beste nodo edo abadegi konputazionalekin batera sarean jarduten duen cluster konputazional bat du. nanoGUNE da clusterraren jabea eta haren bitartez, eskala atomikoan simulazio konputazionalak gauzatea beharrezkoa duten zentruko zein kanpoko ikerketa taldeei edota erakundeei edo enpresei zerbitzua eta laguntza eskaintzen die. Talde honek azaltzen duen egiturak eta posizionamenduak eta ikerketa zentru bezala nanoGUNEren determinazioak, oinarri irmoekin eta etorkizunerako bideragarritasun guztiarekin *Simune* zerbitzua martxan jartzea bermatu dute.

Emilio Artachok argi ikusten du “*nanoteknologiaren oinarritutako etorkizuneko aplikazioak garatu ahal izateko beharrezkoa dela burutzen diren esperimenduak, intereseko sistemetako eskala nanometrikoko simulazio teorikoekin osatzea*”. Kalkulu algoritmoen garapen esanguratsuek eta konputazio cluster berrien prozesamendu ahalmenaren gorakadek, simulazioen gaitasuna biderkatzea eragin dute. Ondorioz, eskala molekularrean nanosistemak nola jokatzeko edota materialeak nola diseinatu behar diren jakiteko aurreikuspen zehatzagoak egitea ahalbideratu da.

Nanogailu berrien deskribapen teorikoak eta modelazioak eta eskala nanometrikoko suertatzen diren gertakari desberdinek, Materia Kondentsatuko Fisikan eta Kimika Konputazionalan jatorria duten teori hurbilpenak eta kalkulu tekniken aplikapenak behar izaten dituzte. Hauek guztiak esparru desberdinetan aplikagarriak izan daitezke (Fisikan, Kimikan, Materialeen Fisikan, Biofisikan, Optikan, Ingeniaritzan, Ingurugiroan, etb.): erabat desberdinak diren disziplinak nanoteknologiaren esparruan elkargunea edo lotura izaten dute. Artachok adierazten duenez, “*disziplina anitzeko ezinbesteko fokapen hau nanoGUNE bertan bereziki ematen da*”.

Teoriako Taldea finkatu eta *Simune* zerbitzua martxan jarri ondoren, euskal zentroak bere konpromisoak bideratzen jarraitzen du, disziplina arteko eredu batenpean lanean diharduten 9 taldeen bitartez, nanozientzian eta nanoteknologiaren bere ikerketa lerroak zabalduz, eta Euskal Herriko lehiakortasuna eta gizarte garapena sustatzeko asmoz ezagutza berria sortuz.

* * *

INFORMAZIO GEHIGARRIA

Emilio Artacho

Materia Kondentsatuko fisiko teorikoa da. 1990. urtean Madrilgo Unibertsitate Autonomoan Materia Kondentsatuko Fisikan doktoretza lortu zuen. Europako eta EE.BB.eko ikerketa zentruetan hogeita bost urte baino gehiagoko eskarmentua du. Berkley-en Kaliforniako Unibertsitatean burututako bi urteko ikerketa nabarmentzen da eta beste urte bat Max-Planck Institutuan egoera Solidoaren ikerkuntza burutuz.

1993an Madrilgo Unibertsitate Autonomora bueltatu zen eta 2001. urtean Cambridge-eko Unibertsitateko Lurreko Zientzien departamendura jo zuen bertako katedra lortu eta ondoren, Unibertsitate honetako Cavendish-eko Laborategian bere ikerketak burutuz (Fisika Sailean) non gaur egunerarte bere katedra mantentzen du. Clare Hall-eko “*Professorial Fellow*”-a ere izendatu dute, unibertsitate honetako ikerketa aurreratuen zentrua. Duela gutxi, Physical Review Letters-n bi zenbaki jarraian argitaratu ditu, horietako bat aldizkariaren azala izanik.

www.nanogune.eu

CIC nanoGUNE Consolider
Tolosa Hiribidea, 76
E-20018 Donostia – San Sebastian
+34 943 574 000 · nano@nanogune.eu



“SIESTA” programa

Emilio Artacho, solidoen ezaugarrien simulaziorako nazioarte mailan oihartzun handia izan zuen “SIESTA kodea” (*Spanish initiative for Electronic Simulations with Thousands of Atoms*) bezala ezagutzen den software konputazionalaren garapenean parte hartu zuen estatuko ikerlarietako bat da. Kodearen berri ematen duen argitaratutako artikuluak, azken urteetan nazioarte mailan aipamen gehien jaso dituenen artean kokatzen da (2002an argitaratu zenetik, 3.500 aipamen baino gehiago izan ditu, horrek batz besterterto 300 aipamen baino gehiago zenbatzeak suposatzen du eta adierazgarria da ere Science, Nature edota Physical Review Letters aldizkarietan lortutako islada). Egun, bost kontinenteetako Ikerketa eta garapeneko 1.000 taldetik gora erabiltzen dute Softwarea. Denboraren poderioz “SIESTA”k simulazioaren esparruan iraultza bat eragiteaz gain, oinarritzko printzipioen kalkulu esparruan nazioarteko estandarra bilakatu da.

Emilio Artachok adierazten duen bezala *“kode hau, mundu osoko unibertsitate eta ikerketa zentruetan lan egiten duten ikerlarien eskura dohainik jartzen da, horri esker, egun kode hau erabiltzen duten bi mila talde erregistratuak ditugu eta hauen lanek ikerketa aldizkarietan 3.000 artikulua baino gehiago eragin dituzte”*.

Algoritmoak bitartekoak izanik, kode honek ordenagailuen laguntzaz erabat konplexuak diren sistemen eta prozesuen simulazioak antolatzeke benetako esperimendu konputazionalak burutzea bermatu du. Lortutako emaitzek, laborategietan garatzen diren esperimendu garesti zein luzeetan eskuratzen diren ondorio berdinak izatea ahalbideratzen du. Beraz, dirua eta denbora aurrezten da. Kode honen bitartez eskuratzen diren xehetasunek, gertakari eta propietate zehatzak aurreikustea bermatzen dute eta horrek, ezaugarri bereziak dituzten sistemak diseinatzerakoan berebiziko garrantzia du.

Samsung, Sony, General Electrics, Electricité de France, Sumitomo eta hainbat eta hainbat enpresetako Ikerketa eta Garapen saileko taldeek, egunerokotasunean, kodea erabiltzera jotzen dute. Horrela, Motorolak bere garaian txikienetan txikiena izatera iritsi zen transistorea patentatu zuen konputazio simulazioetan oinarrituta soilik.



CIC nanoGUNE lanza *Simune*, un servicio de simulación a escala atómica dirigido a empresas

*** *Simune* ayudará a las empresas a resolver problemas tecnológicos ahorrando tiempo y costes**

*** El grupo de Teoría de nanoGUNE será el responsable del servicio, que estará enfocado inicialmente al sector energético y de la electrónica**

El CIC nanoGUNE pone en marcha un nuevo servicio denominado *Simune* orientado a dar soporte a todo tipo de entidades y empresas en sus procesos de I+D. Este servicio realizará simulaciones para conocer el comportamiento de la materia a escala atómica, ayudando a resolver problemas tecnológicos concretos al tiempo que se minimiza la inversión.

El servicio, lanzado por nanoGUNE junto con científicos externos, ofrece **simulaciones útiles para muchos sectores**, si bien es cierto que, al menos en un principio, se centrará en aquellas empresas que desarrollan su actividad en el sector energético y electrónico. Ester Sola, responsable del servicio, explica que realizarán “*simulaciones nanométricas de sólidos, líquidos y nanoestructuras basándose en los principios de la física cuántica y utilizando superordenadores*”. Según Sola, “*mediante este tipo de cálculos podemos anticipar cómo puede evolucionar un componente determinado en los próximos años o analizar las propiedades de los materiales para valorar su rentabilidad antes de crearlos físicamente*”. Así, es factible, por ejemplo, predecir la evolución de los residuos nucleares durante tiempos muy largos, evaluar nuevos mecanismos para la reducción de CO₂ en la atmósfera o medir la eficiencia de un nuevo material antes de producirlo.

El servicio ha sido **impulsado por nanoGUNE, a través Emilio Artacho y otros tres investigadores expertos en simulaciones computacionales: Pablo Ordejón** (del ICN2- Instituto Catalán de nanociencia y nanotecnología), **José María Soler** (Universidad Autónoma de Madrid) y **Juan José Palacios** (Universidad Autónoma de Madrid). Los tres primeros (Artacho, Ordejón y Soler) son coautores del código “SIESTA”, un software computacional de gran impacto a nivel internacional, y Juan José Palacios es coautor del código “ANT”.

Investigadores de nanoGUNE emplearán esos y otros códigos para resolver las diferentes casuísticas que se planteen desde el ámbito empresarial. Emilio Artacho, investigador Ikerbasque y líder del grupo de Teoría en el que se enmarca el servicio, confía en que “la suma de conocimiento y experiencia de los investigadores implicados, junto con el equipamiento de nanoGUNE, aporte soluciones para potenciar la competitividad de las empresas”.

Por su parte, **José María Pitarke**, Director General de nanoGUNE, considera que “*este nuevo servicio responde al reto de nanoGUNE de contribuir al desarrollo competitivo del País Vasco favoreciendo que las empresas (pymes, corporaciones, clústers...) incorporen y aprovechen el conocimiento que generan los distintos grupos de investigación de nuestro centro*”. Así, el conocimiento y experiencia de los investigadores implicados en el nuevo servicio hacen factible prestar un **servicio de apoyo al tejido empresarial**. Para ello, ya se ha puesto en marcha la dirección web **simune.nanogune.eu**

Teoría para llegar a la práctica

El grupo de Teoría de nanoGUNE, operativo desde octubre de 2011 bajo la dirección de Emilio Artacho, cuenta con 7 investigadores y sigue creciendo. A nivel de equipamiento cuenta con un clúster computacional, propiedad de nanoGUNE, que opera en red con otros nodos computacionales prestando apoyo a los grupos de investigación de nanoGUNE y de otros centros, entidades o empresas

www.nanogune.eu

CIC nanoGUNE Consolider
Tolosa Hiribidea, 76
E-20018 Donostia – San Sebastian
+34 943 574 000 · nano@nanogune.eu



que precisan realizar simulaciones computacionales complejas a escala atómica. Tanto la estructura y posicionamiento de este grupo, como la determinación de nanoGUNE como centro, han hecho posible lanzar *Simune* sobre una base sólida y con garantías de futuro.

Emilio Artacho tiene claro que “*para el desarrollo de futuras aplicaciones basadas en nanotecnología es vital complementar los experimentos con simulaciones teóricas de los sistemas de interés a escala nanométrica*”. El avance espectacular de algoritmos de cálculo y la creciente potencia de procesamiento de los nuevos clústers de computación aumentan sustancialmente la potencia de las simulaciones, lo que permite hacer predicciones cada vez más certeras sobre cómo diseñar materiales o cómo se comportan los nanosistemas a escala molecular.

La descripción teórica y el modelado de nuevos nanodispositivos y los diversos fenómenos que ocurren a escala nanométrica requieren la aplicación de técnicas de cálculo y aproximaciones teóricas que provienen de la Física de la Materia Condensada y la Química Computacional, pero que son de aplicación en campos muy variados (Física, Química, Ciencia de Materiales, Biofísica, Óptica, Ingeniería, Medio Ambiente, etc.): disciplinas muy diversas que convergen en el campo de la nanotecnología. “Este enfoque multidisciplinar tan necesario está especialmente presente en nanoGUNE”, apunta Artacho.

Tras la consolidación del Grupo de Teoría y la puesta en marcha del Servicio *Simune* el centro vasco continúa cumpliendo sus compromisos, ampliando sus líneas de investigación en nanociencia y nanotecnología articuladas por 9 grupos que trabajan de forma interdisciplinar, y generando nuevo conocimiento con el compromiso de impulsar el desarrollo competitivo y social del País Vasco.

* * *

INFORMACIÓN ADICIONAL

Emilio Artacho

Es físico teórico de la materia condensada. Obtuvo su doctorado en Física de la Materia Condensada por la Universidad Autónoma de Madrid en 1990. Acumula más de veinticinco años de experiencia investigadora en centros de investigación en Europa y EE.UU. Destaca su investigación durante dos años en la Universidad de California en Berkley y otro año en el Instituto Max-Planck para la Investigación del Estado Sólido.

En 1993 regresó a la Universidad Autónoma de Madrid y en 2001 se trasladó al departamento de Ciencias de la Tierra de la Universidad de Cambridge en el que consiguió su cátedra, pasando posteriormente a trabajar al Laboratorio Cavendish (departamento de Física) de esta Universidad donde mantiene su cátedra a tiempo parcial. Fue también nombrado “*Professorial Fellow*” del Clare Hall, un centro de estudios avanzados de esa misma universidad. Recientemente ha publicado dos artículos en dos números consecutivos de la prestigiosa revista *Physical Review Letters*, siendo uno de ellos portada de la revista.

El “programa SIESTA”

Emilio Artacho es uno de los científicos que participó en el desarrollo del “programa SIESTA” (*Spanish Initiative for Electronic Simulations with Thousands of Atoms*), un software computacional para la simulación de las propiedades de sólidos de enorme repercusión mundial. El artículo descriptivo publicado es uno de los más citados internacionalmente en los últimos años (más de 3500 citas desde su publicación en 2002 con más de 300 citas por año con impactos en *Science*, *Nature* o *Physical Review Letters*), y el software es utilizado hoy por más de 1000 grupos de I+D de los cinco continentes. “SIESTA” ha revolucionado el mundo de la simulación y se ha convertido en un estándar mundial dentro de los cálculos de primeros principios.

www.nanogune.eu

CIC nanoGUNE Consolider
Tolosa Hiribidea, 76
E-20018 Donostia – San Sebastian
+34 943 574 000 · nano@nanogune.eu



Como indica Artacho este código “se distribuye gratuitamente a investigadores que trabajan en universidades o centros de investigación de todo el mundo, y en la actualidad tenemos del orden de dos mil grupos registrados cuyos trabajos utilizando este código han dado lugar a más de 3000 artículos en revistas internacionales de investigación”.

A través de diversos algoritmos este código ha hecho posible realizar auténticos experimentos computacionales, para planificar sobre un ordenador simulaciones de sistemas y procesos complejos que dan resultados comparables a los obtenidos en costosos experimentos de laboratorio, pero con un ahorro considerable de tiempo y dinero. Además, este código permite predecir fenómenos y propiedades, lo que a la hora de diseñar nuevos sistemas con propiedades específicas resulta clave.

Numerosas empresas como Samsung, Sony, General Electrics, Electricité de France o Sumitomo lo utilizan asiduamente en sus grupos de I+D. Así, Motorola lo utilizó para el desarrollo del que fue en su momento el transistor más pequeño del mundo, cuya patente obtuvo basándose exclusivamente en las simulaciones.

* * *

Para realizar entrevistas o ampliar información:

Gabinete de prensa: 943 31 08 31 / 658 750 666

Itziar Otegui (Outreach manager - CIC nanoGUNE): i.otegui@nanogune.eu