

# Tamaina kuantikoko efektuak nanoegituren energian

*Eduardo Ogando Arregui*

Elektrizitatea eta Elektronika Saila, UPV/EHU,  
Sarriena Z/G (48940)  
Leioako Campusa

## 1. LABURPENA

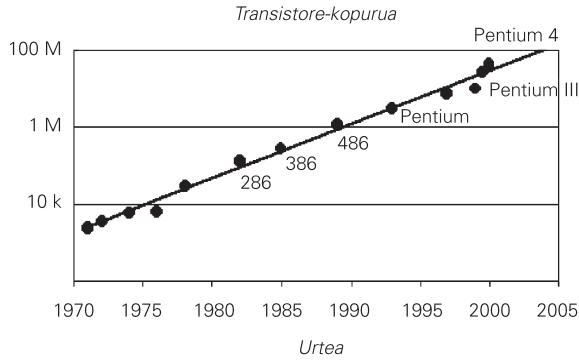
Orokorrean sistema baten tamaina nanometro mailaraino txikitzen badugu bere ezaugarriak guztiz aldatzen dira esperientzia makroskopikoarekin alderatuta. Nahiz eta naturaren legeak berdinak izan eskala guztietan, sistema makroskopikoetan efektu kuantikoen batez bestekoa nabaritzen dugu, hots, sistema erdibanatuz gero, ezaugarriak berdinak dira ; kuantikoki ez da aldaketa nabarmenik.

Nanometro mailako sistemetan, sistemaren tamaina aldatzerakoan egitura kuantikoa ere aldatzen da propietateak erabat aldatuz. Artikulu honetan atomoetan, klusterretan, harietan eta xafletan agertzen diren tamaina kuantikoko efektuak aztertuko dira. Batez ere energiari arituko gara, ezaugarri oso garrantzitsua baita geometria egonkorrenak aurkitzeko, hots sistemak aukeratuko dituen egiturak finkatzeko.

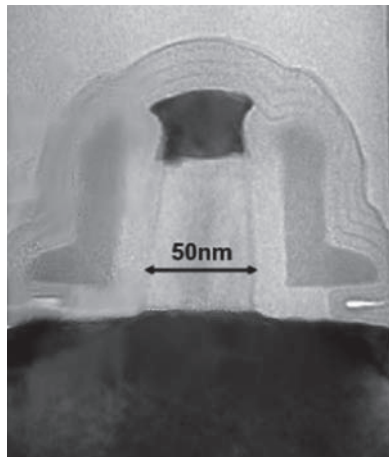
## 2. SARRERA

Azken hamarkadetan elektronikaren teknologiak izugarriko aurrerapenak egin osagai elektroniko tamainaren txikitzearekin batera. Moorek 1965.ean plazaratu zuen bere lege ospetsua: gailu elektroniko baten salneurria mantenduz, bere barruan sartzen diren transistoreen kopurua 18 hilabeteetan behin bikoiztu egingo zen, eta horrela jarraituko zuen gorakadak hurrengo hamar urteetan. Gaur egun Mooren legeak oraindik indarrean dago eta, hazkuntza-joerak pixka batean behera egin duen arren, oraindik tran-

sistore-kopurua 24 hilabetean behin bikoizten da (ikus 1. irudia). Beheratze horrek bi teknologia-abantaila ditu: alde batetik energia gutxiago kontsumitzen da eta bestetik gailu elektronikoen konplexutasuna handitu daiteke.



(a) Transistore kopurua



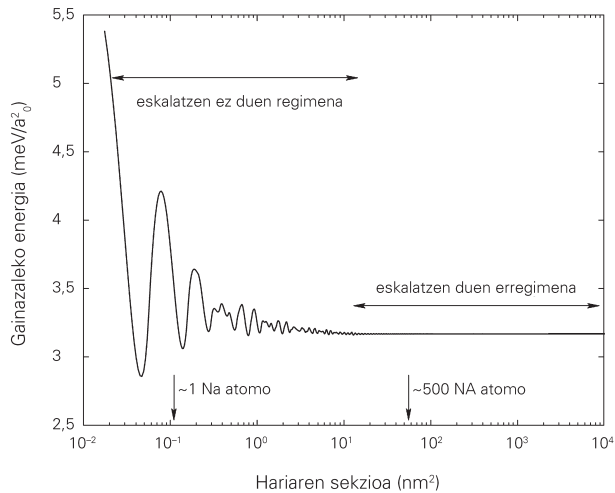
(b)

**1. irudia.** (a) Mooren legea: transistore-kopurua mikroprozesadore batean urtearen funtzioan. (b) Intel transistorea, 90 nanometroko prozesua erabiliz eginda.

Askotan esan da hainbat teknika-mugak hautsi egingo zituztela Mooren legea, baina orain arte, zientzialariek beti aurkitu dute modu bat muga horiek gainditzeko. Hala ere, badirudi muga fisikoetatik hurbil. Oraingo transistoreak «90 nanometroko prozesuen» bidez egiten dira (ikus 1b. irudia), baina 65 nanometroko prozesuan egiteko ere gai dira eta, 32 eta 22 nanometroko prozesuan egindako prototipoak daude; prototipo horietan lanean

arituko dira 2011 urtera arte konpainiak. Baina 16 nanometroko prozesuan egindako transistoreek elektroiturriaren eta drainatzearen artean bakarrik bost nanometroko distantzia izango dute. Distantzia hori dagoelarik, elektroiturri-tunel-korrontea<sup>1</sup> gertatuko da beti eta transistorea ez da erabilgarria izango.

Berez, nanometro mailako tamainaren kontrola eta ezagueraren garrantzi praktikoa azaltzen duen adibide bat dugu silizio teknologiaren garapenean. Baina zientziaren ikuspuntutik efektu fisiko berriak agertzen dira, eta haien ulerkuntza funtsezkoa da teknologiaren muga berriak gainditu ahal izateko.



**2. irudia.** Sodio-nanohariaren gainazal-energia, azaleraren funtzioan. Atomo bati eta 500 atomori dagokien azalerak azaltzen dira.

Normalean ezaugarri fisikoak era leun eta jarraian aldatzen dira sistemaren tamainarekin. Baina sistemaren tamaina nanometro mailaraino ( $10^{-9}$  metro) txikitzen dugunean, ezaugarri hauek aldaketa bortitzak jasaten hasten dira. Eskalatzen duen erregimen batetik eskalatzen ez duen beste batera aldatzen garela esan dezakegu, 2. irudian erakusten den bezala. Transizio horrek bi eragile nagusi ditu: Lehenenik, materiaren atomo-egitura nabarmentzen hasten da, hots, atomo bateko aldaketak eragin nabarmen-garria du ezaugarri fisikoetan. Bigarrenik sistemaren tamaina elektroien

<sup>1</sup> Ikuspegi klasiko batetik, alderantzizko operazioan ez dago elektroiturri-korrenterik, drainatze eta elektroiturriaren arteko langa elektrikoa ezin baitute elektroiek zeharkatu. Baina mekanika kuantikoaren arabera elektroien uhin-funtzioak distantzia finitu bat sar daitezke langaren barruan. Distantzia hau langarena baino handiagoa baldin bada, uhin-funtzioa langaren beste aldean agertzen da eta elektroiturri-korronte bat osatzen da.

uhin-luzeraren tamainakoa da, eta beraz elektroien jokaera kuantikoa agertzen da, eta egoera elektroniko bakar baten aldaketak eragin nabarmena du sistema osoan. Metaletan bi baldintza hauek aldi berean agertzen dira, hots, Fermi uhin-luzera eta atomoen arteko distantzia ordena berekoak dira. Fenomeno horiek harreman estua dute sistemaren dimentsioarekin eta elkarrekin lehian egongo dira edo kooperatuko dute, sistemaren ezaugarriak ezartzeko orduan, portaera bitxia nabarmenduko delarik.

Gaur egun, atomoak gainazal baten gainean banan-banan mugitzeko eta kokatzeko gai gara. Baina, nahiz eta nano-gailuak oso txikiak izan, haiek egiteko behar den atomo-kopurua ikaragarria da. Horregatik, oso garrantzitsua da aztertzea atomoak beraiek bakarrik era ordenatueta jartzeko edo egitura aukeratzeko gaitasuna dituzten sistemak. Hori gauzatzeko lan honetan nanoegitura metalikoen egonkortasuna aztertuko dugu. Hainbat geometria mota aukeratzeko ditugu eta sistemaren dimentsioak enegian duen eragina ikusiko dugu. Sarrera moduan, atomoen egonkortasuna aztertzen hasiko gara, gai ezagunagoa baita; gero, egonkortasuna aztertuko dugu xafla meheetan, nanoharrietan eta klusterretan. Sistema hauek metalikoak izango dira. Izan ere erdieroaleen Fermi uhin-luzera oso handia da eta ez du atomo-egiturak menperatzeko adina indarra, alde batetik eroaleek energia txikiagoa dutelako eta bestetik anitz atomo mugituko beharko lirakeelako Fermi luzera hain handia izanik. Hala ere, efektu kuantikoak oso garrantzitsuak dira beste ezaugarri askoren gainean.

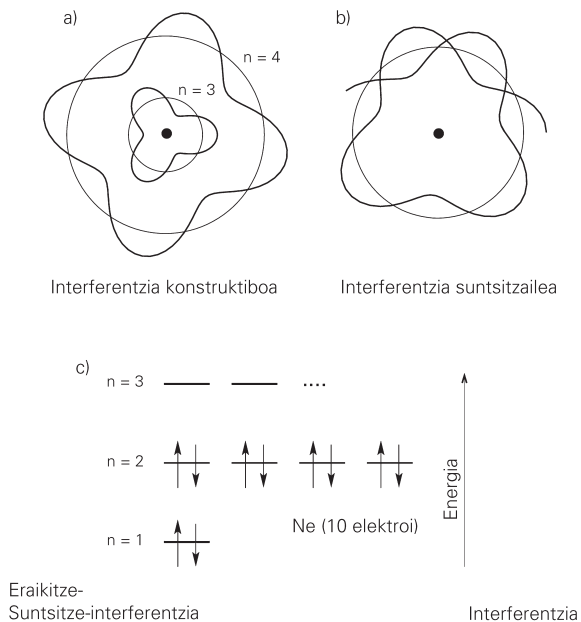
Lan honetan zehar, uko egingo diogu zehaztasun matematikoari eta intuitiboagoak diren eredueterako joko dugu, fisika hobeto ulertzeko eta fenomeno kuantikoa «ikus» ahal izateko.

### 3. ATOMOA

Mekanika kuantikoa garatzen hasi zenean, hurbilketa erdiklasiko batekin hasita azaldu nahi izan zen hidrogeno atomoaren espektra, eta ahalegina hedatuz, elementuak taula periodiko batean ordenatzeko gaitasuna. Teoria erdiklasikoetan elektroiak era estandarrean mugitzen direla suposatzen da, eta gero Borh-Sommerfield-Ishiwaraen [1] kuantizatzeko arauak ezartzen dira. Guk argitze, sinplifikatze eta errazte aldera era intuitibo batean azalduko dugu kuantizazio hori.

De Broglie 1928. urtean plazaratu zuen bere legea: Gorputz guztiei bere energiaren arabera uhin-luzera bat dagokie. Lege horrek materiaren bikoiztasuna deskribatzen du, alegia elektroiak partikula bezala edo uhin bezala joka dezake. Uhin-jokaera hori erabiliko dugu sistema kuantizatzeko.

Atomoaren nukleoak daukan karga positiboak, elektroiak erakartzen ditu. Elektroiak biraka daude nukleoaren inguruan orbita desberdinetan, nukleorantz indar elektrostatikoaren eta indar zentrifugoaren arteko oreka batean. Demagun orbita hauek zirkularrak direla, 3a eta 3b irudian erakus-



**3. irudia.** (a) irudian atomoaren 3. eta 4. orbitak; (b) irudian existitzen ez den orbita. (c) irudian, atomoaren energia mailen edo egitura elektronikoaren eskema; egoerak elektroiekin nola betetzen diren erakusten da.

ten den bezala. Orain kuantizazioa sartuko dugu: elektroiar  $\lambda$  uhin-luzera bat dagokio. Bi uhinek fasean interferitzen dutenean, eraikitze-egoera dugu, 3a irudian hirugarren eta laugarren orbitentzako erakusten den bezala. Ordea, fase-aurkaritzan baldin badaude, bi uhinek elkar suntsitzen dute 3b. irudian ikusten den bezala. Gure kasuan biraka dagoen elektroia uhinak bere buruarekin interferitzen du.

Interferentzia hori eraikitzaile-interferentzia baldin bada, hirugarren eta laugarren orbitentzat egoera kuantikoa egongo da, 3a irudian erakusten den bezala, baina suntsitze-interferentzia bada, ez da egoera kuantikorik izango, 3b irudian ikusten dugun bezala. Orbita hauek elektroikopuru desberdinak egokitzeko gai dira.

Sistemak energia txikiena izatera jotzen du beti

3c irudian eskematikoki erakusten da nola betetzen diren energia mailak. Irudi horrek atomoaren «egitura elektronikoa» erakusten du: elektroiak zer energiatan koka daitezkeen, alegia nola kokatzen diren lehenengo 10 elektroiak (geziekin marraztuak). Aztertu behar ditugun sistemek antzerako egitura elektronikoak izango dituzte.

Bi elektroio dituen lehenengo maila bete bada geruza itxia dela esaten da eta bigarren mailara arte energia-tarte handia dago; beraz hiru elektroio

dituen atomoak bi elektroi dituenak baino energia askoz handiagoa izango du. Bi elektroi dituen atomoa helioa da, lehenengo gas noblea. Gas nobleek azkeneko maila elektroiez betea dute, eta beraien egonkortasunagatik nabarmentzen dira. Beste alde batetik hiru elektroi dituen atomoa litioa da, geruza ireki berrikoa, eta bere erreaktibotasunagatik bereizten dena. Alegia, oso ezegonkorra da eta beste atomo batzuekin erreakzio kimiko baten bidez elkartzeko joera du; horrela, energia handia duen elektroia ematen du eta asko jaisten du bere energia.

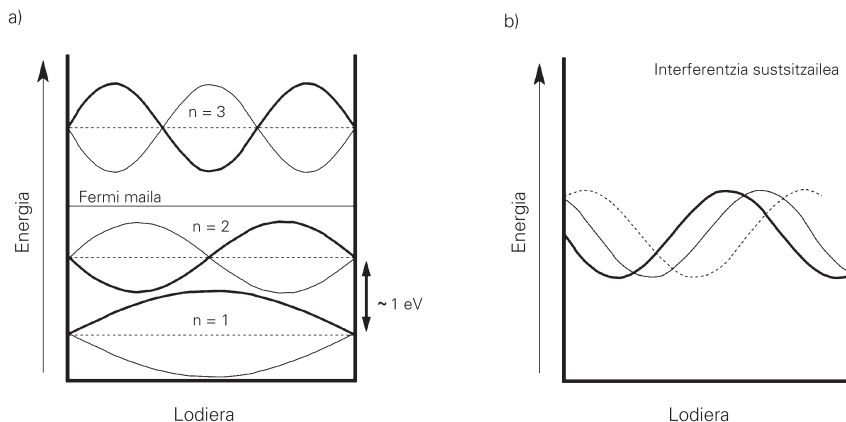
Bigarren maila betetzen denean, hurrengo gas noblea dugu, Neona, berriro oso egonkorra dena.

Beraz, energia maila kuantikoa betea duten atomoek, egonkortasuna dute; hori dela-eta, gas nobleak dira bereziki egonkorrak direnak.

Taula periodikoaren ezaugarriek harremana dute maila horien betetze periodikoarekin, baina horren egitura konplexua eredu bakun honek kontutan hartzen ez dituen beste hainbat eragilek emanda dago.

#### 4. XAFLAK METALIKOAK

Atomoa aztertu eta gero hurrengo sistemara joko dugu, xaflatar alegia. Hauek bi dimentsioko sistemak direla esaten da, bi norabidetan zabalak direlarik beste dimentsioan oso estuak direlako. Sistema hauek lortzeko, adibidez, atomo batzuetako lodiera duen geruza fin bat jar daiteke erdie-roale batzuen gainazalean edo metal batzuen gainazalean [2,3].



**4. irudia.** (a) irudian putzu kuantiko bateko egoera elektronikoen uhin-funtzioak marraztu dira. Fermi maila daudenak elektroiekin okupatuta daude; goialdean hutsik daude. (b) irudian, sunstize-interferentzia duen egoera, existitzen ez dena.  $x$  ardatzak xaflarekin norabide perpendikularra du. Uhin-funtzioak hutsaren eta substratuaren artean konfinatuak daude.  $y$  ardatza egoeren energia da, hots 1 ekuaziokoa.

Sistema hauetan elektroiaren mugimendua bitan banatuko dugu: alde batetik elektroiak xaflaren gainazalaren norabide paraleloan askatasunez mugitzen dira, baina norabide perpendikularrean konfinatuta daude hutsa eta substratuaren lango osatzen duten putzuaren barruan.

Konfinamendu horrek egitura elektronikoaren kuantizazioa dakar, 4a irudian ikusten dugun bezala. Atomoarekin bezala, pentsa dezakegu elektroiak alde batetik bestera mugitzen dagoela baina hala ere egoera bakar batzuk egongo dira: bere buruarekin eraikitze-interferentzia duten uhinei dagozkienak. Egoera elektroniko hauek putzu kuantikoko egoerak direla esaten da. 4b irudiko egoerak, putzuaren ormetan islatzean bere buruarekin fase-aurkaritzan interferitzen du eta ez da ez da bideragarria.  $n$ . putzu kuantikoko egoeraren energia honela lortzen da:

$$\varepsilon_n = \frac{h^2 n^2}{8md^2} \quad (1),$$

non  $d$  xaflaren lodiera,  $m$  elektroiaren masa eta  $h$  Planck konstantea baitira. Formularen oso kontu garrantzitsua dago azpimarratzea interesatzen zaiguna: zenbat eta xafla lodiagoa izan, egoerak orduan eta energia txikiagoa du. Atomoarekin alde nabarmen bat dago: elektroiak askatasun osoz mugitzen dira beste bi norabideetan, eta horregatik, sistema irekia dela esaten da. Beraz, energia zinetikoa gehitu behar diogu elektroiaren energia lortzeko:

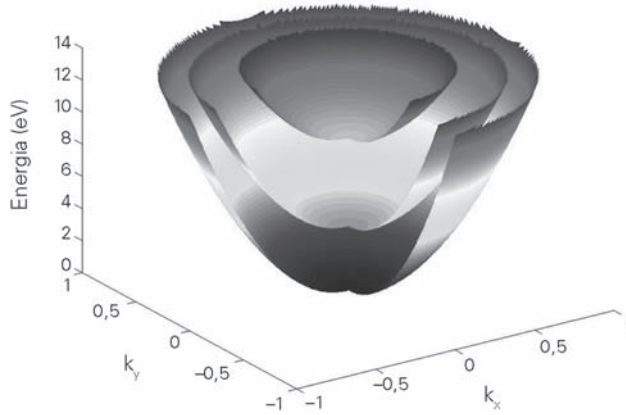
$$\varepsilon = \varepsilon_n + \frac{h^2}{2m} (k_x^2 + k_y^2) \quad (2),$$

Formula honetan,  $\varepsilon_n$  (1)eko konfinamendu energia da; bigarren terminoak,  $x$  eta  $y$  gainazalekiko norabide paraleloei dagokien energia zinetikoa adierazten du. Mekanika kuantikoan honela egingo genuke:

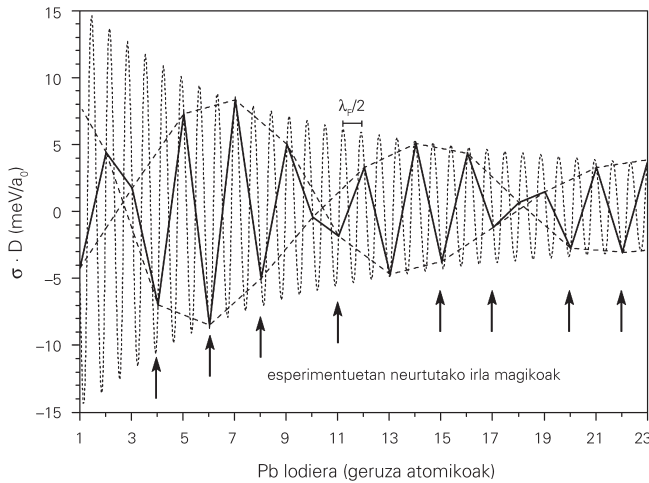
$$h^2 k^2 / 2m = 1/2 mv^2$$

non  $v$  elektroiaren abiadura baita. Beraz, xaflen egitura elektronikoa  $\varepsilon_n$  energian kokaturiko paraboloidak dira, azpibandak dituztenak, 5. irudian ikusten direnak bezalakoak. Elektroiak energia txikieneko egoerak betetzen hasiko dira Fermi mailara deritzon mailara heldu arte (ikus 4. irudia), hots, Fermi mailak elektroiekin bete diren egoerak eta hutsik geratu direnak banatzen ditu.

Zenbat eta lodiagoa izan, orduan eta elektroiei gehiago dituzten xaflak; azpibanda parabolikoak gehiago beteko dira, eta Fermi mailak igo beharko luke. Baina aldi berean (1) ekuazioaren arabera  $\varepsilon_n$  txikitu egingo da, eta ondorioz azpibanda parabolikoak jaitsi egingo dira, Fermi maila gutxi gorabehera energia berean tinko mantentzen delarik.



**5. irudia.** Xafla baten egitura elektronikoa, 2. ekuazioa alegia. Paraboloideen jatorrizko energia 3a irudiko egoerak dira. Koloreek ez dute esanahi berezirik.



**6. irudia.** Puntu-lerroak, berun-xaflako energiaren oszilazioak azalera-unitateko; lodierarekin biderkatuta, oszilazioak handitzeko. Lerro jarraian, geruza 1,2,3,... geruza atomikoei dagokien balioak. Lerro etenak begia laguntzeko marraztu dira. Geziekin, laborategiko saioretan neurtutako magiazko uharteak [2].

4. irudiko  $\epsilon_n$  egoerari dagokion azpibanda betetzen hastearen efektua eta aurreko atalean atomoak energi mailak betetzen hasten zirenean gertatzen zen efektua antzerakoak dira. Atomoetan ezaugarri periodikoak agertzen ziren era berean, orain ere agertuko dira. Energiar arituko gara eta berak erakusten dituen oszilazioez. Lodiera handitzerakoan energia ere



handitzen da, baina efektu kuantikoak direla-eta, oszilazio txikiak jasaten ditu energia honek. 6. irudian marratzen dira lerro zatikatuarekin energiaren oszilazio hauek lodieraren funtzioan;  $\sigma$  energia lodierarekin biderkatuta dago lodiera handietako oszilazioak handitzeko eta ikusi ahal izateko. Energia kurba berunari dagokio baina ez gara luzatuko kalkuluaren zehaztasunetan [4]. Xaflaren lodiera energia gutxieneko maila batean dagoenean sistema egonkorra da eta lodiera energia gehienezko mailari dagokionean, ezeگونkorra, beste lodiera bat aukeratzeko joera erakutsiz.

Lodiera  $d=n \lambda_F/2$  delarik,  $\lambda_F$  Fermi mailari dagokion uhin luzera da, eta  $n$  nodo dituen egoera Fermi mailan kokatzen da. Lodiera handitzean egoeren energia txikitzen da (1) ekuazioaren arabera, eta lodiera  $d + \lambda_F/2$  denean,  $n+1$  nodo dituen uhin-funtzioa kokatzen da Fermi mailan. Egoerak betetzen hasten diren maiztasun hori, 6. irudian ikus daitekeen  $\lambda_F/2$  oszilazio-maiztasun bera da.

6. irudian lerro jarraikiarekin geruza atomiko osoei dagokien lodierak lotu ditugu, hots, laborategiko saio batean eraiki eta neur daitezkeen geruza atomiko bateko, biko, hiruko,... xaflak dira. Honek oszilazio bitxiak erakusten ditu: taupadekin.

Energia txikiak dituzten lodierak egonkorragoak dira inguruan energia handiak dituztenak baino. Atomoek, lodiera egonkorreko kokapenak aukeratzetik dituzte. Efektu hau laborategiko saioetan neurtzen da eta oso gutxitan agertzen diren xafla batzuk daude (lodiera ezeگونkorrei dagozkienak). Beste batzuk berriz askoz maizago aurkitzen dira (lodiera egonkorrei dagozkienak), eta «magiazko lodierak» izen erakargarria eman zaie. 6. irudian neurtutako magiazko uharteak gutxienezko energi balioekin bat datozen geziekin markatzen dira [2,4].

Beraz, nabaria da efektu kuantikoen aldaketa garrantzitsuak eragiten dituztela ezaugarrietan, erakutsitako berunaren kasuan lodiera egonkorrenak ezartzeko adina indarra baitute.

## 5. NANOHARIAK

Aurreko atalean ikusi dugu dimentsio bat murriztearen efektua. Orain konfinamendua bi dimentsiotan azaltzean gertatzen dena aztertuko dugu. Horretarako nanohariak ikertuko ditugu; horrelakoetan, elektroiak bakarrik geratzen den hirugarren dimentsioan mugi daitezke era aske batean.

Zilindro-simetria duten sistema mikroskopiko asko daude. Horien artean oso ezagunak dira karbono-nanohodiak, beraien geometria dotoreagatik leku berezia merezi dutenak ditugu [5]. Hauek, grafitozko geruza bati tolestuz eraikitzen dira, eta geruza hauek atomo bakarreko lodiera izan dezakete.

Nanohodiak oso luzeak izan daitezke ( $\sim 1\mu\text{m}$ ) eta erradio desberdinekoak (10-100 Å artekoak). Gainera metalez bete daitezke, barruko metala

atomoz osatutako katea izatera iritsi daitekeelarik. Atomo-kate egin ahal izateko aukerak, dimentsio bakarreko sistema bat ematen digu, ezaugarri berrien ikerketarako arlo zabala eskainiz.

Bi erdieroaleren arteko mugan, elektroi-gasak nanohari bat bezala konfinatzea lor daiteke [6]. Horretarako geometria bereziko transistoreak eta konfinatze-potentzial elektrikoak erabiltzen dira Teknika litografikoen aurrerapenak direla medio, 3.5 eta 20 nm tarteko diametroko silizio-harizpiak egitea ere lortu da [7].

Hona hemen beste nanohari mota batzuk: molekula-hari luzeak eta ADN molekula zilarrerako euskarria bezala erabiliz sintetizatu dituzten 100 nm lodiera eta 12  $\mu\text{m}$  luzera dituzten hariak [8].

Transmisioko mikroskopio elektronikoarekin urrezko xafletan hari oso egonkorrak lortu dira. Horiek egiteko, mikroskopioaren elektroi-iturriarekin, urrezko xafla bonbardatuz bi zulo egiten dira bat bestearen ondoan, eta tartean nanozubia edo nanoharia geratzen dira [9].

Hala ere, nanohari metaliko bat egiteko erarik errazena bi metal-zatien arteko kontaktua apurtzean lortzen da. Horrek tunel-efektuko mikroskopioarekin egin daiteke. Mikroskopio mota hau metalezko punta batez osatuta dago, eta eginda dagoen eragatik, puntan atomo bakarra du. Punta hori atomo mailako zehaztasunez mugi daiteke. Normalean gainazalak aztertzeke erabiltzen da punta, itsu batek behatzak objektuak aztertzeke erabiltzen dituen era berean. Mikroskopioaren punta laginean txertatuz lortzen den nanokontaktua edo nanoharia, punta atzerantz mugituz argaldu daiteke; normalean kontaktua apurtu baino lehenago atomo bateko kontaktua dago [10].

Aurreko teknikarekin antz handia duen beste teknika oso emankor bat ere badugu. Honetan haria euskarri malgu baten gainean ezartzen da, gero euskarria okertuz haria luzatu eta hausten delarik. Kontaktua hautsi eta gero, bi zatiak hurbildu daitezke berriro ukipenean jartzeko [11].

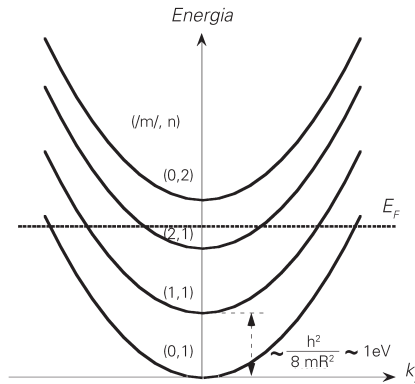
Nanohari batean leku estuena da punturik garrantzitsuena, ezaugarri nagusiak erradio txikienean emanda baitatoz. Guk nanohariak ikertzeke eredu simple bat hartuko digu, eta luzera infinituko zilindro gisako ereduetan ezarriko ditugu, zilindroari nanohariaren puntu estuenaren erradioa ezarritz.

Elektroien mugimendua bitan banatuko digu: alde batetik hariaren ardatzarekiko paralelo doan norabidea ( $z$ ), non elektroiak aske mugituko baitira  $^2k_z^2/2m$  energia zinetikoarekin. Ardatzaren norabide perpendikularrean elektroiak, konfinatuta daude zilindro erako putzu batean, eta egoera elektroniko diskretuak agertuko dira  $\epsilon_{nm}$  energiarekin (sistema zilindrikoetan  $n$  eta  $m$  zenbakiak behar dira egoerak definitzeko). Egitura elektronikoa

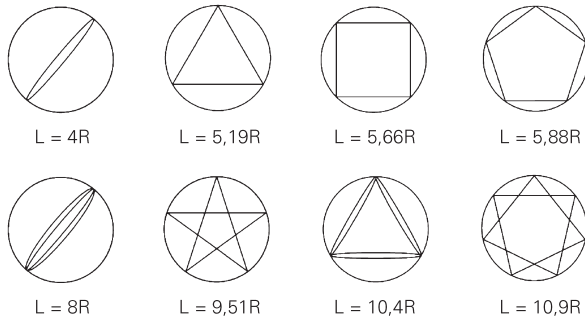
$$\epsilon = \epsilon_{nm} + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} \quad (3)$$

formulatik emanda dator, hots, azpibanda parabolikoz osatzen da, 7. irudian erakusten den bezala. Aurreko sistemetan bezala hariaren erradioa

handitzean  $\epsilon_{nm}$  konfinamendu-energiak behera egingo du. Azpibanda hauek Fermi maila zeharkatuko dute eta oszilazioak eragingo dituzte ezaugarri elektronikoetan.



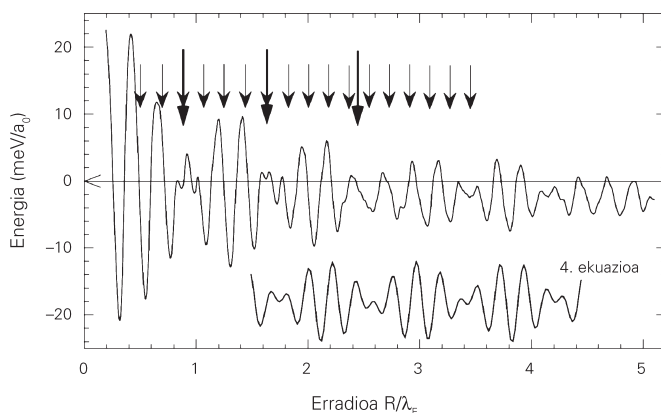
**7. irudia.** Hari baten egitura elektronikoa: 3. ekuazioa. Parabolaren jatorria eragoera perpendikular diskretuen energia da.  $E_F$  Fermi mailaren energia ere erakusten da.



**8. irudia.** Nanohariaren norabide perpendikularrean elektroiek egiten dituzten ibilbide klasiko eta itxi batzuk, gero De Brogliearen legea erabiliz kuantizatuko ditugunak. Orbiten luzera  $R$  hariaren erradioaren funtzio modura adierazten da.

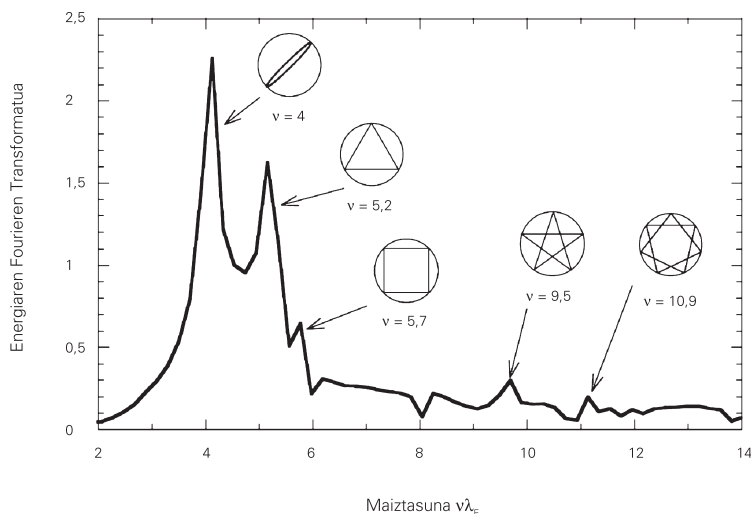
Fisika erdiklasikoaren ikuspuntutik elektroiek hodiaren barne hormetan islatzen dira eta ondorioz biraka daude hodiaren barnean. Lehengo sistemetan bezala egoera jakin bat egoteko, elektroien uhin-funtzioak bere buruarekin eraikitze-interferentzia izan behar du. Horretarako orbita itxia izatea da lehen baldintza. 8. irudian orbita hauetako batzuk eta hauen luzera  $L$  erakusten dira. Infinitu orbita mota daude. Xafletan eta atomoetan bezala eraikitze-interferentzia Fermi mailan  $L=n\lambda_F$  denean gertatuko da or-

bitan ere; horrelakoetan, egoera bat Fermi mailan dagoela esaten dugu. Nanoharien eta xafletan arteko antzekotasunak asko dira. Nanohariaren erradioa handitzerakoan, egoera perpendikularren energiak behera egiten du, eta egoera hauek banan-banan Fermi maila zeharkatzen joango dira, xafletan geratzen zen bezala. Hala ere, xafletan orbita bakarra zegoen, penduluaren baliokidea, eta nanoharietan orbita-kopurua infinitua da eta bakoitzak luzera desberdina du. Erradioa handitzean  $L$  orbita bakoitzaren luzera handitzen doa.  $L = n\lambda_F$  denean,  $n$ . orbitak Fermi mailan eraikitze-interferentzia du, eta  $L$  orbita bakoitzerako desberdina da. Beraz, orbita bakoitzari dagozkion egoerak Fermi maila zeharkatzen joango dira orbita horri dagokion maiztasunarekin. Hala ere, ikusiko dugun bezala, orbita pendularra eta orbita triangeluarra dira garrantzia duten orbita bakarrak.



**9. irudia.** Nanoharien energia-oszilazioak luzera-unitateko. Gezi txikiekin laborategiko saioetan neurtutako magiazko hariak. Gezi handiekin laborategiko saioetan neurtutako taupaden kokapenak. Behealdean, 4. ekuazioarekin lortzen den interferentzia patroia.

Xafletan bezala, erradioa handitzerakoan energia ere handitzen da, baina efektu kuantikoak direla-eta, oszilazio txikiak jasaten ditu energia honek. Sodio-hari infinituaren energiaren oszilazioak 9. irudian erakusten ditugu, erradioaren funtzioan. Nabari da oszilazioei modulazio bat gainezartzen zaiela. Itxuraz 6. irudikoen antzerakoak dira baina hemen ez dugu inongo kokapen atomikorik aukeratu, nanoharien puskatze hauetan ez baitago hori egin ahal izateko egitura atomiko ordenaturik. Magiazko erradio horiek, laborategi-saioetan ere neurtu dira, eta gezi txikiekin markatuta daude; gure hari infinituko eredu sinplearekin gutxi gorabehera bat datoz. Laborategiko saioetan taupadak ere (zabalera txikiko oszilazioak) neurtu dituzte. Gezi luzeekin adierazten dira, kalkuluekin bat eginez [11,12].



**10 irudia.** Nanohariaren energiaren (8. irudia) Fourieren transformatua. Gailur bakoitzari dagokion orbita adierazten da.

Jatorria ezagutzeko 10. irudian Fourieren transformatua egin dugu oszilazioen maiztasun-espektroa aztertzeko. Ikusten dugunez bi gailur nagusi agertzen dira, orbita pendularrari eta triangeluarrari dagozkienak. Hau da, bi orbita mota nagusi ditugu eta bakoitzak bere maiztasun propioarekin oszilazioak eragiten ditu energian, hau da:

$$E = \cos\left(2\pi\nu_p \frac{R}{\lambda_F}\right) + \cos\left(2\pi\nu_t \frac{R}{\lambda_F}\right) \quad (4)$$

Ezaguna da antzeko maiztasunak ( $\nu_p$  eta  $\nu_t$ ) dituzten bi oszilazio nahasten direnean interferentzia-patroian taupadak agertzen direla. Horrela 9. irudiarren behealdean ikusten dugu goiko ekuazioak energiaren jokaera deskribatzen duela. Xaflen kasuan egitura elektronikoa eta egitura atomikoaren arteko erlazioak edo akoplamenduak taupadak sortzen zituen. Nanoharien kasuan ez dugu ezertarako kontuan hartu egitura atomikoa, eta egitura elektronikoa hariaren ezaugarriak mugatzen ditu.

Hala ere, laborategiko beste saio batzuetan alderantziz gertatzen da; atomo-egiturak elektronikoa baino garrantzi handiagoa bereganatzen du; horixe da magiazko erradioak eragiten duena. Kasu horretan hariak atomo-egitura ordenatuagoa du eta hariaren ebakidurak itxura hexagonalak du. Hexagonoaren aurpegi bat osatzen denean, haria egonkorragoa da, eta are gehiago hexagono bera osatzen denean, hots sei aurpegiak osatu direnean.

## 6. KLUSTERRAK

Metal-klusterrak atomoz osatutako sistema esferikoak edo ia esferikoak dira. Horietan azken dimentsioa ere murriztu da eta elektroiak guztiz konfinatuak daude. Metal baten gas bat lortzea da Klusterrak egiteko teknika hedatuena; gasa hoztu egiten da gero, atomoak tanta nanometrikoetan kondentsatzeko, ur lurrina ur-tantek egiten dutenaren antzera [13]. Metalaren gasa lortzeko berotu egin behar da labe batean, laser baten bitartez,... Gero beste hainbat teknika daude beraien tamaina eta kopurua neurtzeko.

Klusterren barnean elektroiak ibilbide zuzenean mugitzen dira, nanoharien antzera, hormen kontra talka egin arte. Beraz nanoharrietan gertatzen diren orbita berak agertzen dira. Hemen ordea, elektroiak norabide guztietan konfinatuak daude, bi orbita nagusiak trianguluarra eta laudiarra izan behar direlarik. Beraz, energiaren kurbak antz handia dauka 9. irudian ikusten dugunarekin. Beraz, magiazko erradioetako klusterrak izango ditugu, oso egonkorak direnak eta ugariago agertzen direnak esperimenduetan neurtuta izan direnak alegia.

Beraz, magiazko erradioetako klusterrak izango ditugu, oso egonkorak eta besteak baino ugariagoak; hauek dira laborategiko saioetan neurtzen direnak. Bakarrik gehituko dugu batzuetan egitura atomikoak edo bestelako efektuek ere magiazko erradioak edo esferikotasuna alda dezaketela [14].

## 7. ONDORIOAK

Elektroi aske deritzen metalak aztertu ditugu, metaletan aritu gara. Horrelakoetan elektroiak askatasunez mugitzen dira metalaren barruan (elektroi-gasa deritzona osatuz) eta ez da ia nabaritzen ioien eragina.

Teoria erdiklasikoa erabiliz sistemaren energia aztertu dugu elektroien ikuspuntutik. Energiaren gutxieneko balioek sistemen egonkortasunarekin lotura zuzena dute eta ikusi dugu eredu sinple batzuk nahiko direla sistema horiek azaltzeko gai direla. Erabileren ikuspuntutik ezaugarrietan eragina duten efektu kuantikoek garrantzia handia dute, adibidez sistemek bere burua egitura jakin batzuetan antolatzeke.

## 8. ESKERRONAK

Eskertu nahi nuke Estibaliz Apiñanizek euskararen zuzenketan eman didan laguntza

## **BIBLIOGRAFIA**

- [1] A. GALINDO eta P. PASCUAL, *Mecánica Cuántica* (Alhambra, 1978).
- [2] R. OTERO, A. L. VÁZQUEZ DE PARGA, eta R. MIRANDA, Phys. Rev. B 66, 115401 (2002).
- [3] T-C CHIANG *Science*, Vol 306, Issue 5703, 1900-1901 , 2004ko Abenduaren 10a.
- [4] E. OGANDO, N. ZABALA, E. V. CHULKOV, eta M. J. PUSKA, Phys. Rev. B. 69, 153410 (2004).
- [5] C. DEKKER, Physics Today 52 N 5, 22 (1999).
- [6] B. J. VAN WEES, H. VAN HOUTEN, C. W. J. BEENAKKER, J. G. WILLIAMSON, L. P. KOUWENHOVEN, D. VAN DER MAREL eta C. T. FOXON, Phys. Rev. Lett. 60, 848 (1988).
- [7] B. W. REED, J. M. CHEN, N. C. MACDONALD, J. SILKX eta J. F. BERTSCH, Phys. Rev. B 60, 5641(1999)
- [8] E. BRAUN, Y. EICHEN, U. SIVAN eta G. BEN-YOSEPH, Naure 391, 775 (1998).
- [9] Y. KONDO and K. TAKANAYAGI, Phys. Rev. B. 79, 3455 (1997).
- [10] M. BRANDBYGE, J. SCHIØTZ, M. R. SØRENSEN, P. STOLTZE, K. W. JACOBSEN, J. K. NØRSKOV, L. OLESEN, E. LAEGSGAARD, I. STENSGAARD, eta F. BESENBA-CHER, Phys. Rev. B 52, 8499 (1995).
- [11] A. I. YANSON, I. K. YANSON, and J. VAN RUITENBEEK, Nature 400, 144 (1999).
- [12] M. J. PUSKA, E. OGANDO, and N. ZABALA, Phys. Rev. B. 64, 033401 (2001).
- [13] W. A. DE HEER, Rev. Mod. Phys. 65, 611 (1993).
- [14] M. BRACK, Rev. Mod. Phys. 65, 677 (1993).