

I. Historial académico, docente e investigador

II. Proyecto Docente

III. Proyecto Investigador

Idoia García de Gurtubay Gáligo  
Leioa 28 de Junio de 2012

# ***DATOS PERSONALES***

## ⇒ **Nombre y Apellidos:**

Idoia García de Gurtubay Gállico

## ⇒ **Situación actual:**

Profesora Agregada de Universidad  
Departamento de Física de la Materia Condensada.  
Facultad de Ciencia y Tecnología. UPV/EHU.

***I . HISTORIAL ACADÉMICO,  
DOCENTE  
E INVESTIGADOR***

# ***TITULACIÓN ACADÉMICA***

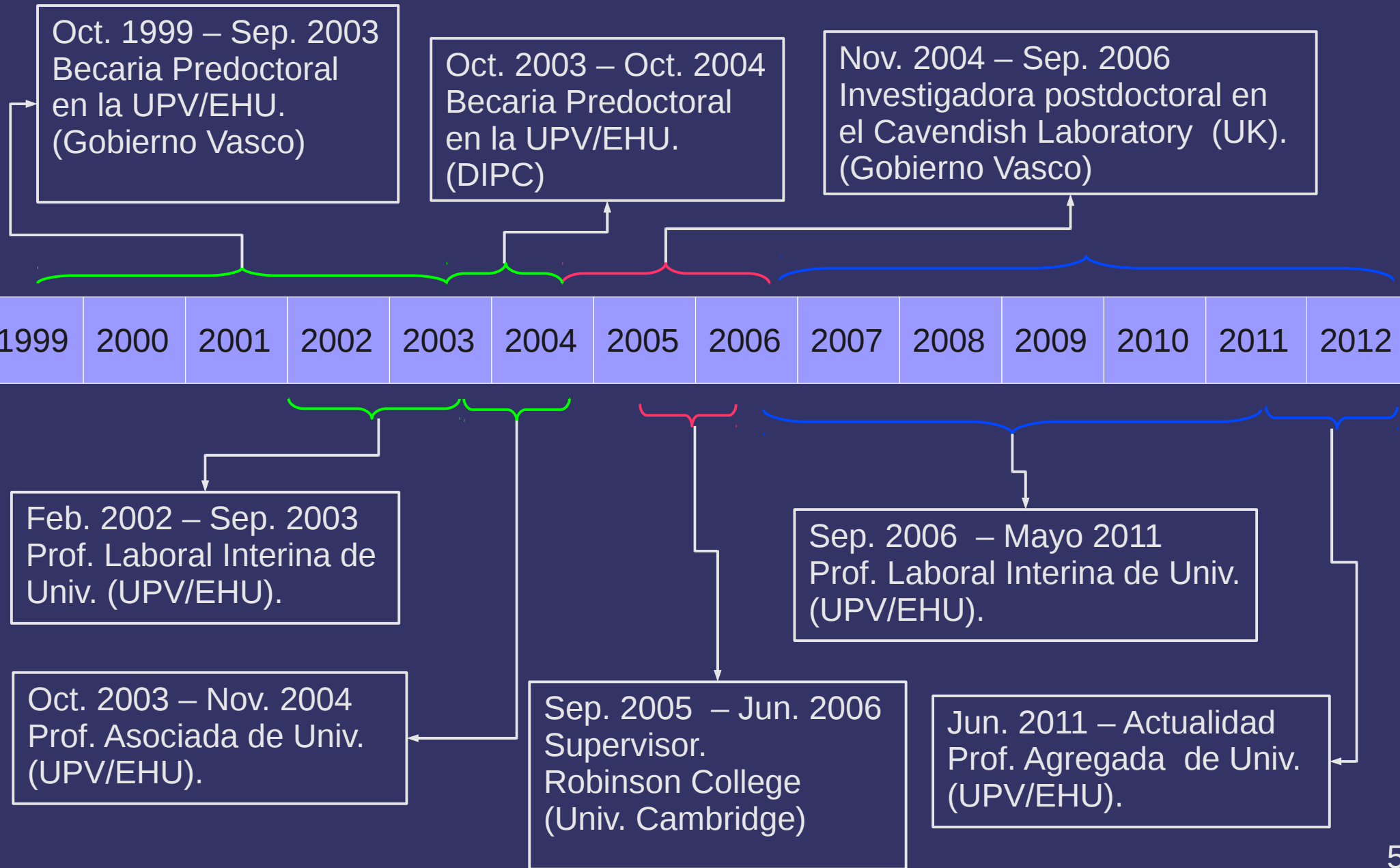
- ➡ Licenciada en Ciencias Físicas (UPV/EHU). Junio 1999.
- ➡ Grado de Licenciatura en Ciencias Físicas. Noviembre 2000.

*Premio extraordinario de Licenciatura (1999).*

- ➡ Diploma de Estudios Avanzados en Ciencia y Tecnología de Materiales. Noviembre 2001.
- ➡ Doctora en Ciencias Físicas (UPV/EHU). Octubre 2004.

*Premio extraordinario de Doctorado (Curso 04-05).*

# PUESTOS DOCENTES Y DE INVESTIGACIÓN



# Actividad docente

Ciclo	Estudios	Curso	Asignatura	Curso Académico
Primero	Licenciatura en Ciencias Físicas	1º	Prácticas de Física General	1999-2000
	Licenciatura en Física	1º	Fundamentos de Técnicas Experimentales	2001-2002 2002-2003 2003-2004
	Licenciatura en Física	2º	Técnicas Experimentales en Física II	2001-2002 2002-2003 2003-2004
	Licenciatura en Geología	1º	Física	2001-2002 2002-2003 2003-2004
	Licenciatura en Física	1º	Fundamentos de Física	2006-2007 2007-2008 2008-2009 2009-2010
	Licenciatura en Química	1º	Física I	2006-2007 2007-2008 2008-2009 2009-2010

# Actividad docente (cont.)

Ciclo	Estudios	Curso	Asignatura	Curso Académico
Segundo	Licenciatura en Física	4º	Métodos Experimentales I	2006-2007 2007-2008 2008-2009 2009-2010
Natural Science Tripos		1º	Physics IA	2005-2006
Máster Universitario en Física y Tecnología de Materiales		-	Métodos Computacionales en Física del Estado Sólido	2009-2010 2010-2011 2011-2012
Grado en Matemáticas		1º	Física General	2010-2011
Grado en Física Grado en Ingeniería Electrónica		1º	Física General	2010-2011 2011-2012
Grado en Física Grado en Ingeniería Electrónica		1º	Técnicas Experimentales I	2011-2012

# Innovación Docente

Programa IBP	2007, 2008
Aula virtuales de apoyo a la docencia	2007-Actualidad

## PROYECTOS FINANCIADOS

Física en Acción <ul style="list-style-type: none"><li>• FCT-09-1318 (FECYT)</li><li>• FCT-10-988 (FECYT)</li></ul>	2009, 2010
Actividades de orientación para el alumnado de 2º Bachillerato <ul style="list-style-type: none"><li>• Gobierno Vasco - UPV/EHU</li></ul>	2009, 2010, 2011

## CURSOS

Certificado-Diploma de Aptitud Pedagógica	2004
Perfeccionamiento de Euskera para profesores que imparten docencia universitaria	2003, 2008, 2011
Perfeccionamiento de Inglés para profesores que imparten docencia universitaria	2007
Elaboración de plan docente según criterios ECTS	2007
Introducción a <i>Moodle</i>	2007
Taller de Metodologías Activas	2011
Trabajo cooperativo mediante WEB 2.0	2011



# *Tesis dirigidas*

## ➞ Tesis de Máster

- “*Fases de alta presión en los hidruros de boro*”.  
Ainhoa Suárez Alcubilla. Septiembre 2011.

## ➞ Tesis Doctorales

- “*Superconductividad inducida por la presión en aleaciones de hidrógeno*”.  
Ainhoa Suárez Alcubilla.  
Fecha prevista de defensa: 2015  
Directores: Idoia García de Gurtubay y Aitor Bergara

# *Actividad Investigadora*

1. Etapa predoctoral
2. Etapa postdoctoral
3. Tras la etapa postdoctoral

# 1. Etapa predoctoral

## Actividad Investigadora

### A) Función de respuesta en sólidos reales

a) Metales nobles

b) Metales transición 3d

Colaboración ORNL

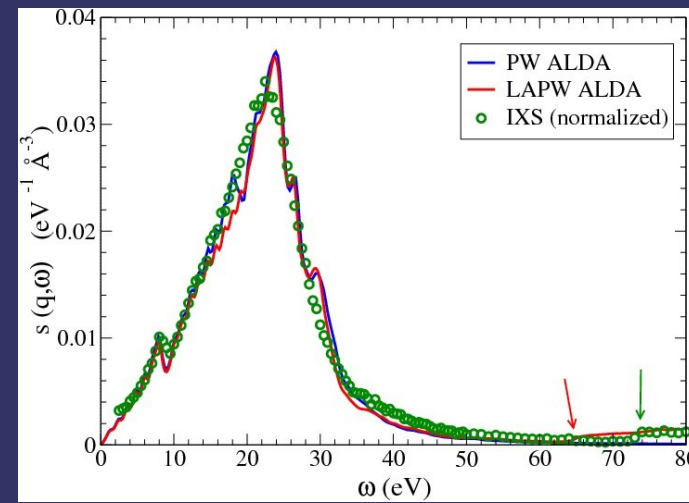
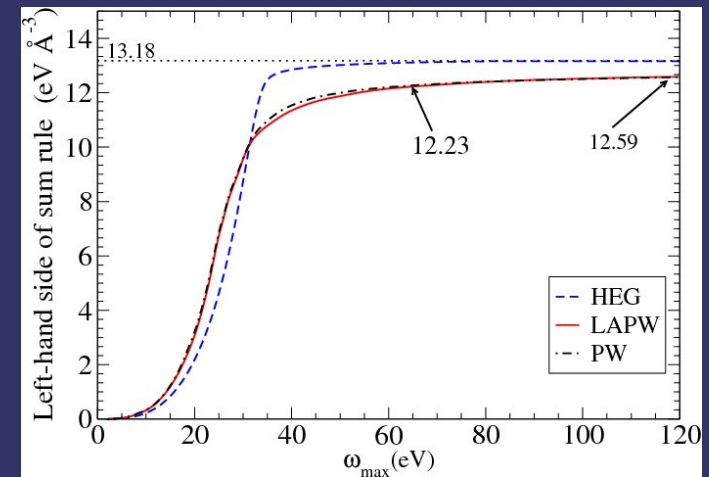
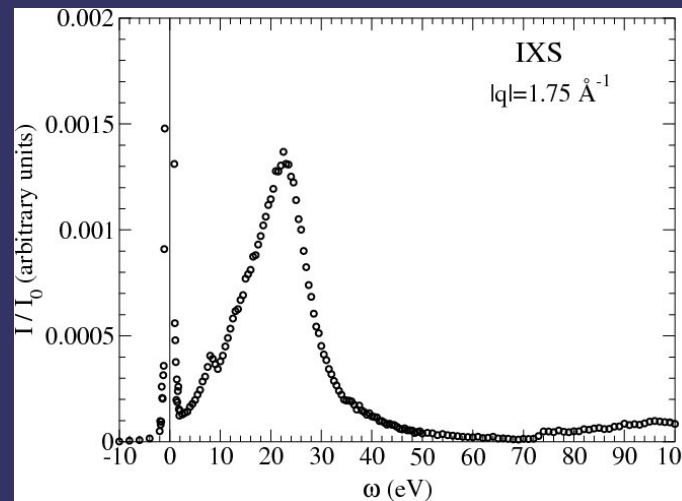
-TDDFT  
-Medidas IXS

Escalar medidas a unidades absolutas sin parámetros ajustables.

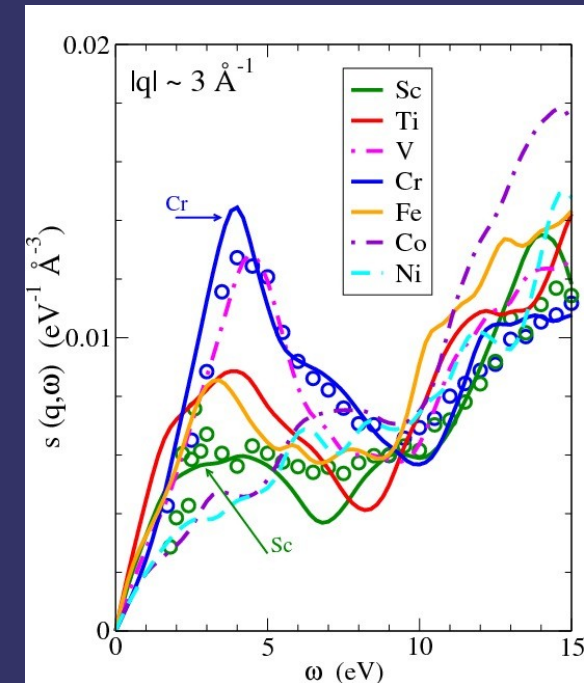
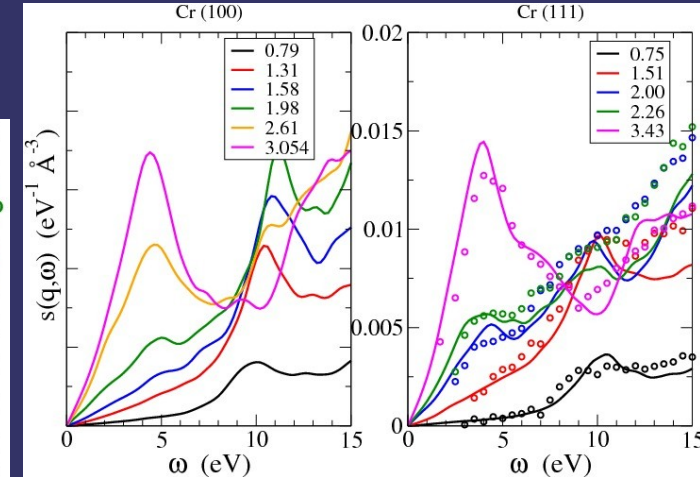
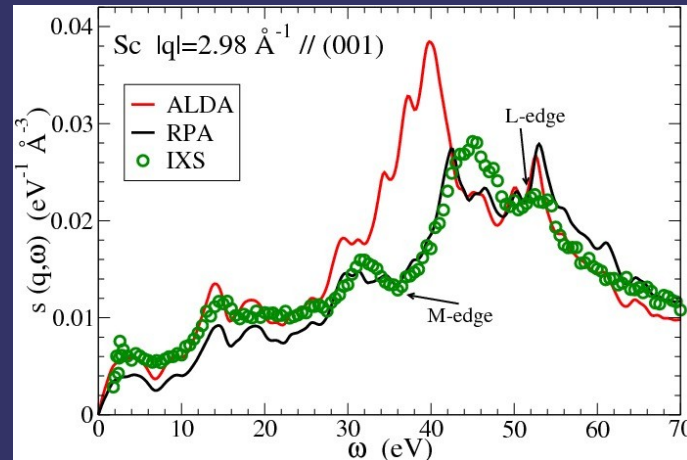
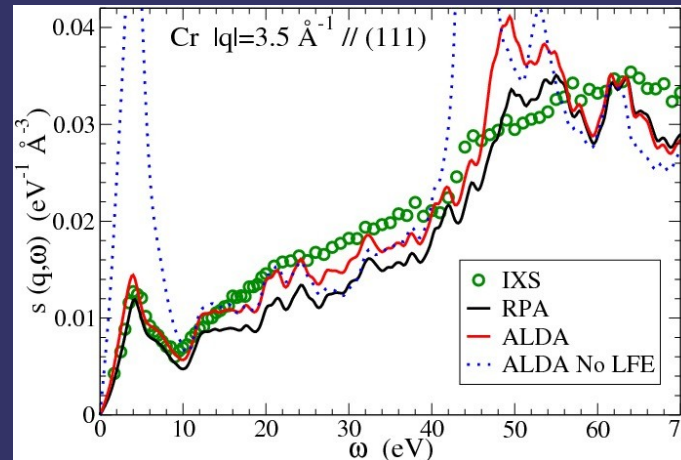
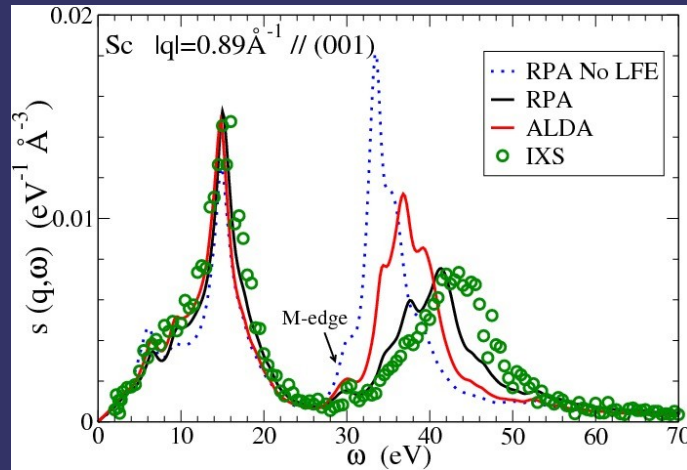
Utilizar la misma geometría en las medidas IXS para los metales 3d

Gurtubay et al. *Comp. Mater. Sci.* **22**, 123 (2001)

Al: muestra patrón



- Orbitales  $d$  ocupados parcialmente
- LAPW (3s, 3p semicore)
- RPA, ALDA. Efectos locales cristalinos.

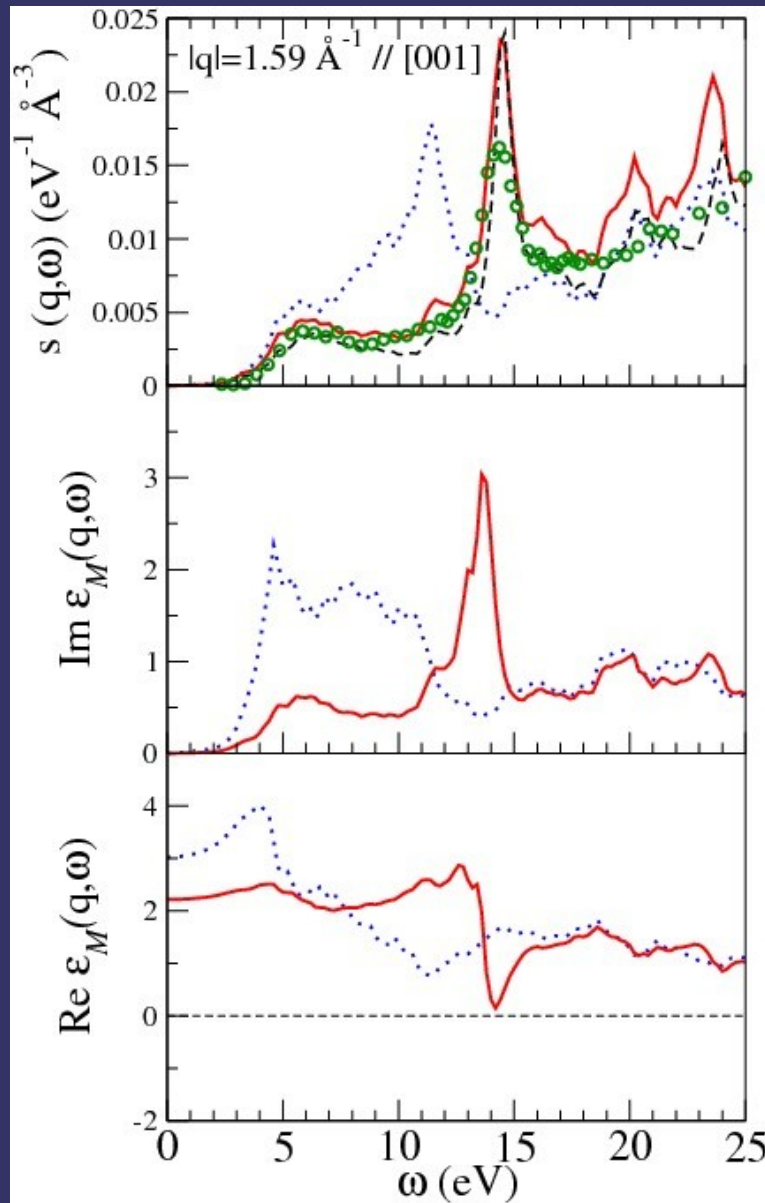


Transiciones  $d \rightarrow d$   
no visibles en el  
régimen óptico ni en  
EELS

Utilidad de IXS

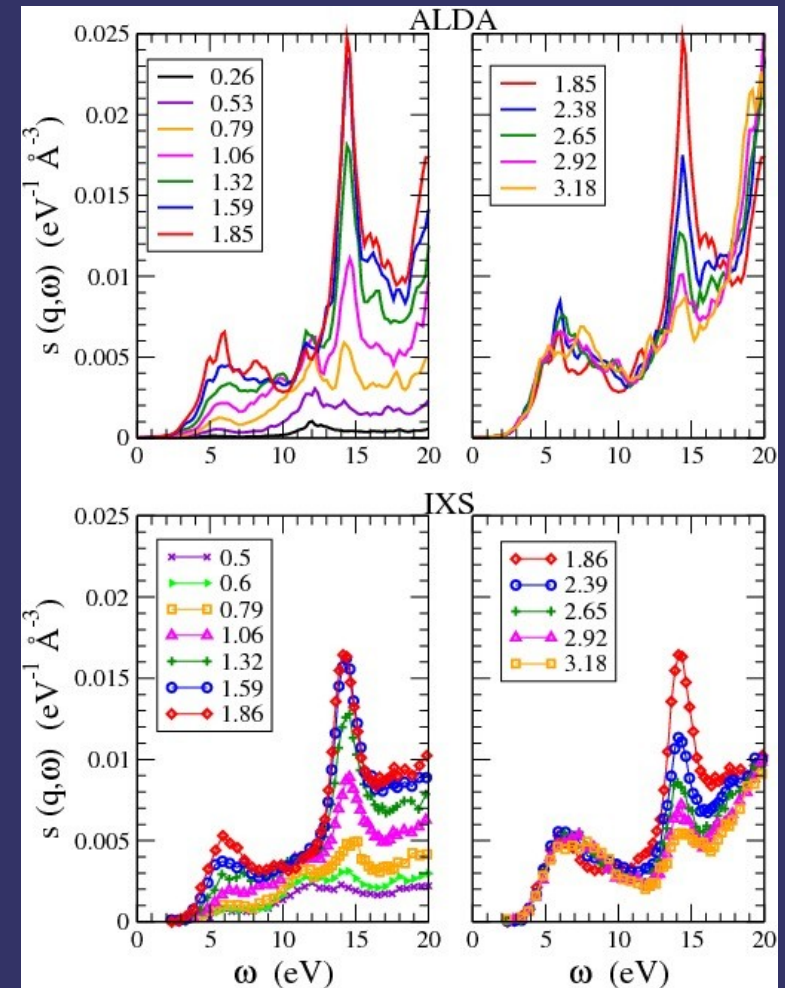
Gurtubay et al. *Comp. Mater. Sci.* **30** 104 (2004)  
Gurtubay et al. *Phys. Rev. B* **72**, 125117 (2005)

## c) Oxido de Titanio



Valores altos de  $q$ :

- Excitación colectiva que solo se manifiesta cuando los CLFE están incluidos en el cálculo
- No monótonico
- $\text{VO}_2$



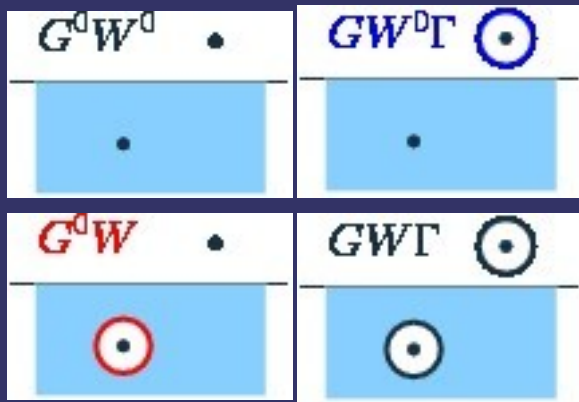


# 1. Etapa predoctoral

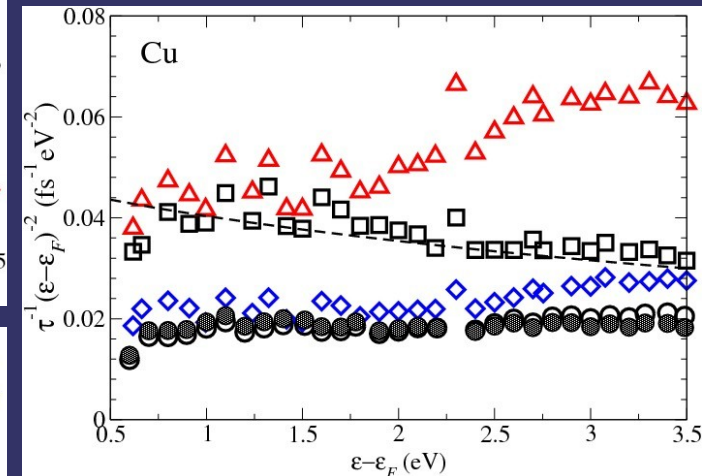
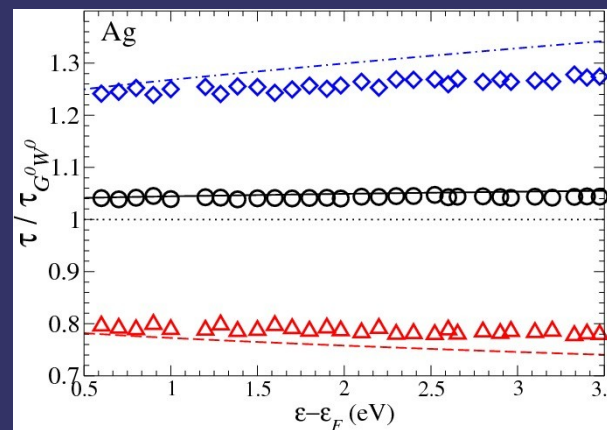
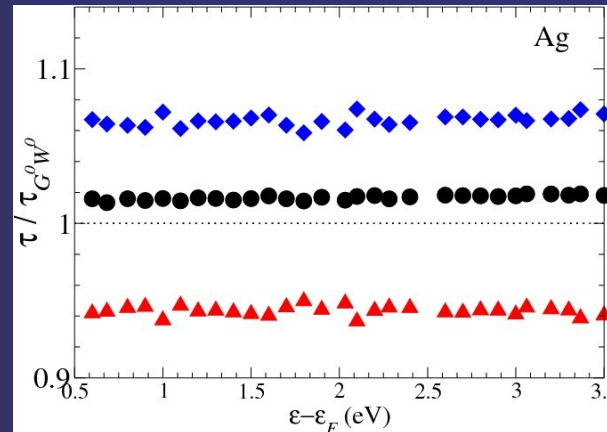
## Actividad Investigadora

### B) Vidas medias de electrones calientes en metales nobles

- Orbitales  $d$  ocupados cerca del nivel de Fermi
- PW + PP
- Bandas + XC



- Campo local cristalino
- Efectos XC
- Efecto de los electrones  $d$

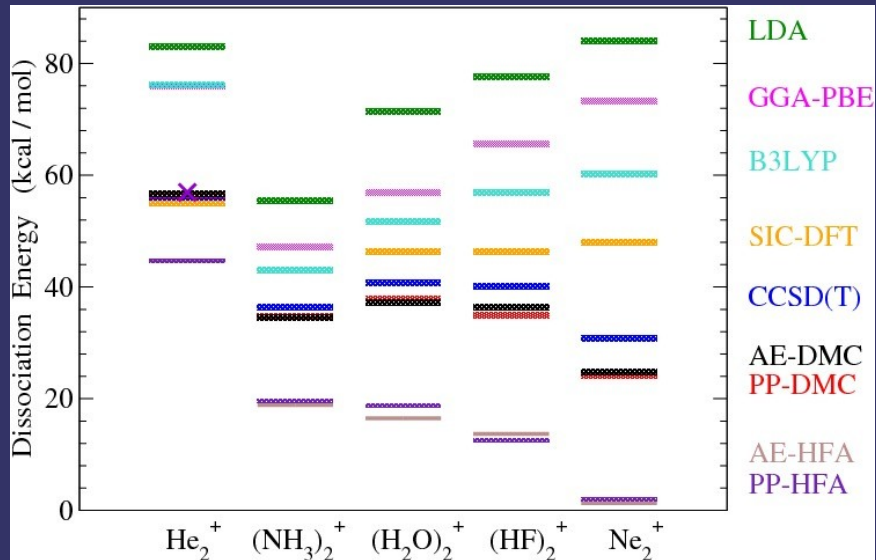


Gurtubay et al. *Phys. Rev. B* **69**, 245106 (2004)  
Zhukov et al. *Phys. Rev. B* **64**, 195122 (2001)

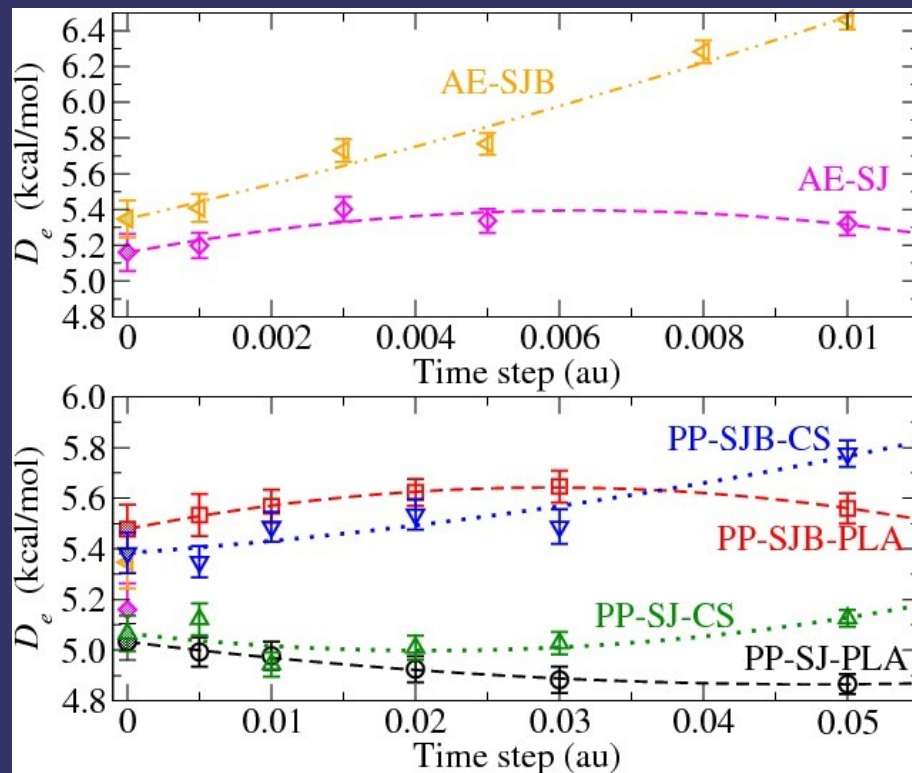
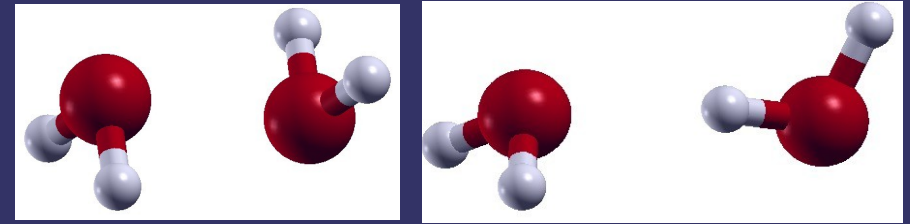
### C) Poder de frenado en sólidos reales

## 2. Etapa postdoctoral

### Cálculos de Monte Carlo cuántico (QMC)



- Energías de disociación de dímeros radicales



- Energías de disociación del dímero de agua:

-Introducción de correlación backflow

$$\text{H}_2\text{O}: E_{\text{DMC-SJB}} = E_{\text{exp}} + 10 \text{ mHa}$$

-Comparación AE y PP

-2 esquemas de PP

Gurtubay et al. *J. Chem. Phys.* **124**, 024318 (2006)

Gurtubay & Needs, *J. Chem. Phys.* **127**, 124306 (2007)

### 3. Tras la etapa postdoctoral

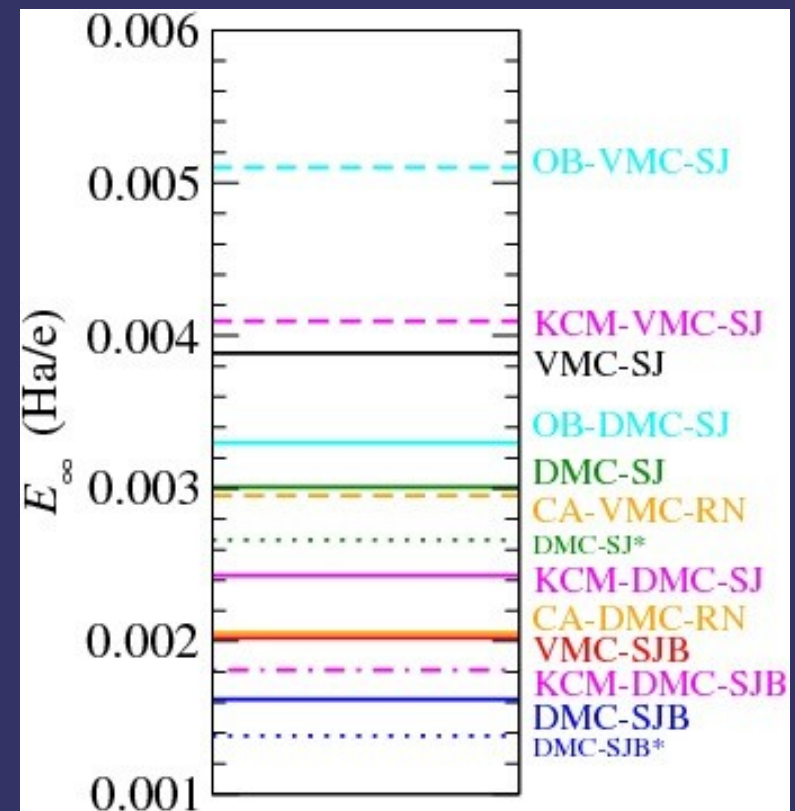
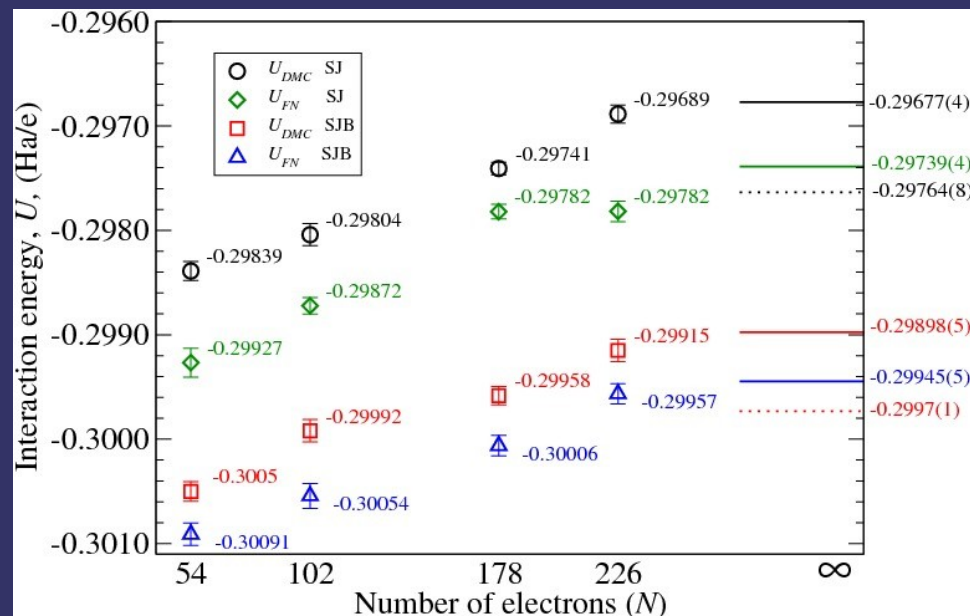
### Actividad Investigadora

#### A) Poder de frenado en superficies

Vergniory, Silkin, Gurtubay,  
Pitarke *Phys. Rev. B* **78**,  
155428 (2008)

#### B) QMC. Energía de interacción y factor de estructura

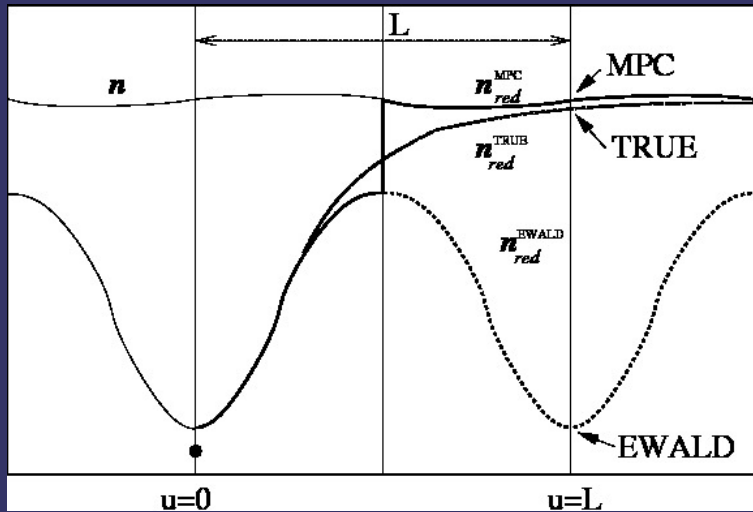
- Energía del estado fundamental de un GEH
  - Corrección de la extrapolación
  - Inclusión de correlaciones de backflow
- Energía de interacción exacta de un GEH
  - Observable que no conmuta con  $H$



Gurtubay et al. *J. Phys. Condens. Matter* **22**,  
065501 (2010)

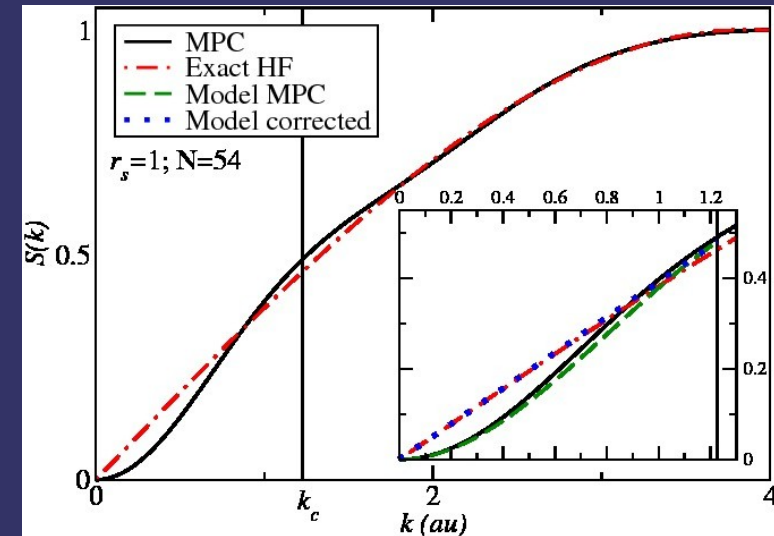


- Errores asociados al tamaño finito en sólidos.  
Corregir la energía de interacción MPC con el factor de estructura.



$$n^{MPC} \rightarrow S_k \rightarrow U^{MPC}$$

Orden natural en  $k$



- GEH no interactuante
- GEH interactuante
- GEH semi-infinito
- Corrección implícita al potencial de Coulomb

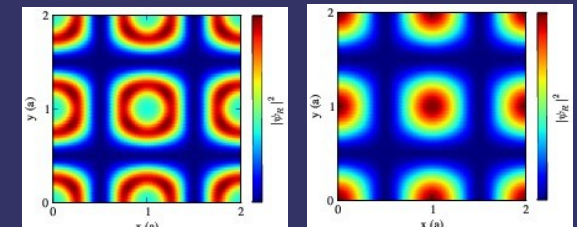
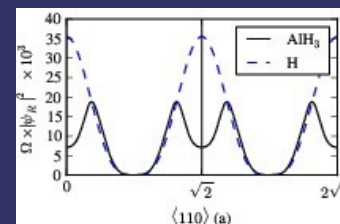
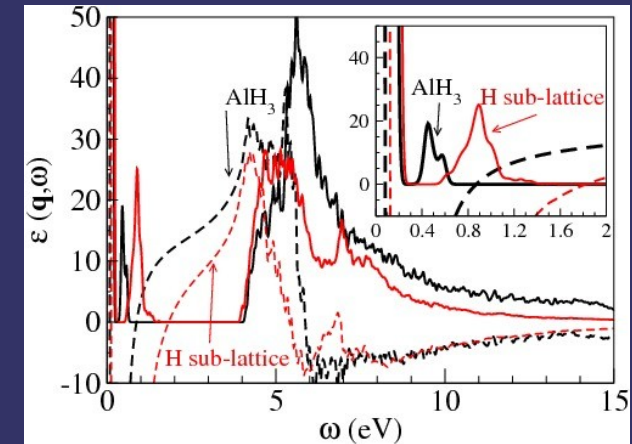
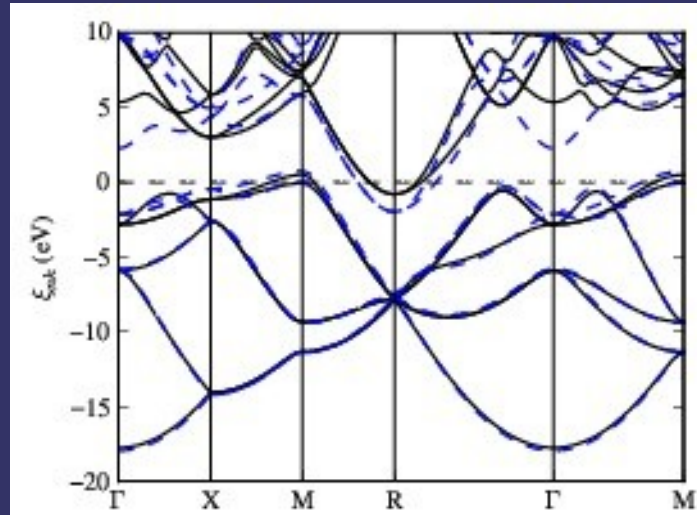
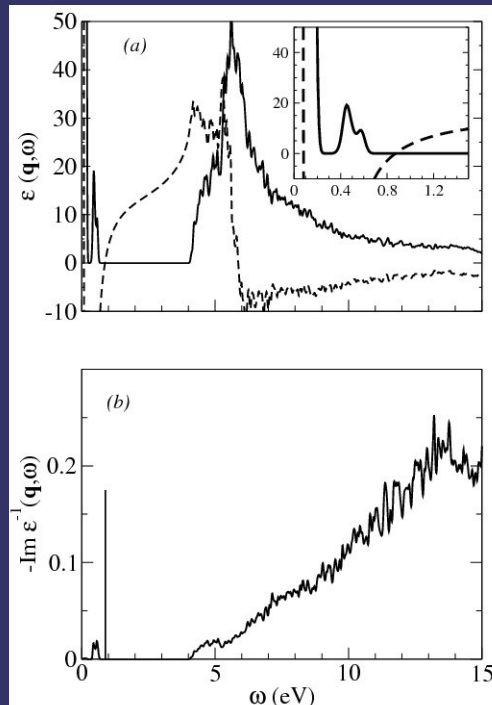
- Nueva parametrización de la energía de un GEH

Gaudoin, Gurtubay, Pitarke, *Phys. Rev. B* **85**, 125125 (2012)

Gurtubay, Gaudoin, Pitarke (*En preparación*)

## C) Hidruros de metales ligeros a altas presiones

- Fases de alta presión en hidruros de boro
- Función de respuesta de  $\text{AlH}_3$  a altas presiones
  - Plasmón no amortiguado de baja energía
  - $\text{AlH}_3$  es una red de H, perturbada por la presencia de átomos de Al



# Publicaciones

		FI (ISI)	Citas (ISI)
1	<p>“Dynamic structure factor of gold”.</p> <p><b>I. G. Gurtubay</b> , J. M. Pitarke, I. Campillo, A. Rubio.  <i>Comp. Mater. Sci.</i> <b>22</b>, 123-128 (2001).</p>	0,677	5
2	<p>“Corrected local-density approximation band structures, linear-response dielectric functions and quasiparticle lifetimes in noble metals”.</p> <p>V. P. Zhukov, F. Aryasetiawan, E. V. Chulkov, <b>I. G. Gurtubay</b>, P. M. Echenique.  <i>Phys. Rev. B</i> <b>64</b>, 195122 (2001).</p>	3,070	65
3	<p>“Effects of the crystal structure in the dynamical electron density-response of hcp transition metals”.</p> <p><b>I. G. Gurtubay</b>, Wei Ku, J. M. Pitarke, A. G. Eguiluz.  <i>Comp. Mater. Sci.</i> <b>30</b>, 104 (2004).</p>	1,424	4
4	<p>“Nonlinear, band-structure, and surface effects in the interaction of charged particles with solids”</p> <p>J. M. Pitarke, <b>I. G. Gurtubay</b>, V. U. Nazarov.  <i>Adv. Quantum Chem.</i> <b>45</b>, 247 (2004).</p>	0,576	0
5	<p>“Exchange and correlation effects in the relaxation of hot electrons in noble metals”</p> <p><b>I. G. Gurtubay</b>, J. M. Pitarke, and P. M. Echenique.  <i>Phys. Rev. B</i> <b>69</b>, 245106 (2004).</p>	3,075	13
6	<p>“Large crystal local-field effects in the dynamical structure factor of rutile TiO<sub>2</sub>”.</p> <p><b>I. G. Gurtubay</b>, Wei Ku, J. M. Pitarke, A. G. Eguiluz, B. C. Larson, J. Tischler, and P. Zschack.  <i>Phys. Rev. B</i> <b>70</b>, 201201 (2004)</p>	3,075	8

# Publicaciones (cont)

		FI (ISI)	Citas(ISI)
7	<p>“Electron-hole and plasmon excitations in 3d transition metals: <i>Ab initio</i> calculations and inelastic x-ray scattering measurements”.</p> <p><b>I. G. Gurtubay</b>, J.M. Pitarke, Wei Ku, A.G. Eguiluz, B.C. Larson, J.Tischler, P. Zschack, and K.D. Finkelstein.  <i>Phys. Rev. B</i> <b>72</b>, 125117 (2005).</p>	3,185	22
8	<p>“Quantum Monte Carlo calculations of the dissociation energies of three-electron hemibonded radical cation dimers”.</p> <p><b>I. G. Gurtubay</b>, N.D. Drummond, M.D. Towler, and R.J. Needs.  <i>J. Chem. Phys.</i> <b>124</b>, 024318 (2006).</p>	3,166	8
9	<p>“Dissociation energy of the water dimer from Quantum Monte Carlo calculations”</p> <p><b>I. G. Gurtubay</b> and R.J. Needs.  <i>J. Chem. Phys.</i> <b>127</b>, 124306 (2007).</p>	3,044	14
10	<p>“Energy loss of charged particles moving parallel to a magnesium surface: <i>Ab initio</i> calculations”.</p> <p>M. G. Vergniory, V. M. Silkin, <b>I. G. Gurtubay</b>, and J. M. Pitarke.  <i>Phys. Rev. B</i> <b>78</b>, 155428 (2008).</p>	3,332	2
11	<p>“Benchmark quantum Monte Carlo calculations of the ground-state kinetic, interaction and total energy of the three-dimensional electron gas.”</p> <p><b>I. G. Gurtubay</b>, R. Gaudoin and J. M. Pitarke.  <i>J. Phys.: Condens. Matter</i> <b>22</b>, 065501 (2010).</p>	2,332	2

# Publicaciones *(cont)*

		FI (ISI)	Citas (ISI)
12	<p>“Undamped low-energy plasmon in <math>\text{AlH}_3</math> at high pressure.”</p> <p><b>I. G. Gurtubay</b>, B. Rousseau and A. Bergara.  <i>Phys. Rev. B</i> <b>82</b>, 085113 (2010).</p>	3,774	1
13	<p>“Momentum-space finite-size corrections for Quantum-Monte-Carlo calculations.”</p> <p>R. Gaudoin, <b>I. G. Gurtubay</b> and J. M. Pitarke.  <i>Phys. Rev. B</i> <b>85</b> 125125 (2012).</p>	-	-
14	<p>“New parametrization of the exchange-correlation energy of a homogeneous electron gas with backflow corrections.”</p> <p><b>I. G. Gurtubay</b>, R. Gaudoin and J. M. Pitarke  <i>(En preparación)</i></p>		

Primera autora : 9

Indice h : 6

# *Participación en proyectos de investigación subvencionados*

➤ ESTATALES IP: Prof. Dr. J. M. Pitarke de la Torre.

## **1 RESPUESTA CUADRÁTICA Y EFECTOS DE MUCHOS CUERPOS EN SÓLIDOS REALES ( BFM 2000-0359)**

Entidad Financiadora: Ministerio de Educación y Cultura.

Duración: 19 Diciembre 2000 - 19 Diciembre 2003.

Tipo participación: Investigadora en formación

## **2 EXCITACIONES ELECTRÓNICAS, RESPUESTA DINÁMICA Y EFECTOS DE MUCHOS CUERPOS EN SÓLIDOS (1/MCYT 00063.310-15215/2003).**

Entidad Financiadora: Ministerio de Educación y Cultura.

Duración: 1 Diciembre 2003 - 1 Diciembre 2006.

Tipo participación: Investigadora.

## **3 EXCITACIONES ELECTRÓNICAS, RESPUESTA DINÁMICA Y EFECTOS DE MUCHOS CUERPOS EN SÓLIDOS (FIS2006-01343).**

Entidad Financiadora: Ministerio de Educación y Ciencia.

Duración: 1 Diciembre 2006 - 1 Diciembre 2009.

Tipo participación: Investigadora.

## **4 EXCITACIONES ELECTRÓNICAS, RESPUESTA DINÁMICA Y EFECTOS DE MUCHOS CUERPOS EN SÓLIDOS, SUPERFICIES Y NANOESTRUCTURAS (FIS2009-09631).**

Entidad Financiadora: Ministerio de Ciencia e Innovación

Duración: 1 Enero 2010 - 31 Diciembre 2012.

Tipo participación: Investigadora.

# *Participación en proyectos de investigación subvencionados*

## ➔ AUTONÓMICOS

**SUBVENCIÓN GENERAL A GRUPOS DE INVESTIGACIÓN CONSOLIDADOS Y DE ALTO RENDIMIENTO DE LA UPV/EHU.**

### **1 EXCITACIONES ELECTRÓNICAS EN NANOESTRUCTURAS Y SUPERFICIES.**

(9/UPV 00206.215-13639/2001).

Entidad Financiadora: Gobierno Vasco y UPV/EHU

Duración: 1 Octubre 2001 - 31 Diciembre 2006.

Tipo participación: Investigadora.

IP: Prof. Dr. P. M. Echenique Landiribar.

### **2 ESTUDIO TEÓRICO DE PROPIEDADES ESTRUCTURALES Y ELECTRÓNICAS DE NANOESTRUCTURAS (GIC07/11).**

Entidad Financiadora: Gobierno Vasco UPV/EHU

Duración: 1 Enero 2007- 31 Diciembre 2012.

Tipo participación: Investigadora.

IP: Prof. Dr. Andrés Arnau Pino.

## ➔ EUROPEO

### **1 NANOQUANTA NETWORK OF EXCELLENCE OF THE 6<sup>TH</sup> FRAMEWORK PROGRAMME**

(NMP4-CT-2004/500198 ).

Entidad Financiadora: Comunidad Europea

Duración: 1 Junio 2004 - 31 Mayo 2008.

Tipo participación: Investigadora.

IP: Prof. Dr. P. M. Echenique Landiribar.

# *Contribuciones a Congresos y Reuniones Científicas*

## ⇒ 28 comunicaciones

- 9 orales
- 19 póster

## *Seminarios impartidos*

- ⇒ How long do excited electrons live? Relaxation of hot electrons in noble metals. Theory of Condensed Matter Group, Cavendish Laboratory, Universidad de Cambridge, UK. 4 Mayo 2005.
- ⇒ QMC dissociation energies of three-electron hemibonded radical cation dimers... and water clusters. Quantum Monte Carlo in the Apuan Alps I. Vallico Sotto, Italia. 26 Julio 2005
- ⇒ QMC calculations of the water dimer: Timestep errors and backflow calculations. Quantum Monte Carlo in the Apuan Alps II. Vallico Sotto, Italia. 23 Julio 2006.



# *Cursos recibidos*

Practical Computing for Scientists. From Data Mining to High Performance Issues	2001
Ultrafast surface dynamics	2001
Atoms and Molecules at Surfaces	2001
Introducción a la teoría cuántica de muchos cuerpos I	2002
Introducción a la teoría cuántica de muchos cuerpos II	2003
From Electrons to Materials Properties: Basic Theory and Computational Methods	2003
<i>Ab-initio</i> many body theory	2007
Advanced school on quantum Monte Carlo methods in physics and chemistry	2008
DN-NSM 2011. USPEX workshop	2011

# *Estancias en centros de investigación extranjeros*

- Dept. of Physics and Astronomy, Univ. of Tennessee, Knoxville y Solid State Division, Oak Ridge National Laboratory, (USA)  
2001, 2002, 2003
- Hahn Meitner Institut, Berlin (Germany)  
2001
- Cavendish Laboratory, University of Cambridge (UK)  
2004-2006, 2007
- Department of Materials Physics. University of Leoben, Leoben (Austria)  
2007

# Otros méritos

## ➔ DOCENTES

Calidad de la actividad docente. En relación con el ítem “*En general pienso que es un buen profesor o profesora*” en la encuesta de opinión del alumnado sobre la docencia de su profesorado. Servicio de Evaluación Docente. UPV/EHU

Media de 4.2 sobre 5.

(2002-2011)

Un periodo de actividad docente reconocido (quinquenio de docencia)

Acreditación Lingüística para la impartición de docencia en la UPV/EHU. Vicerrectorado de Relaciones Internacionales. Plan de Plurilingüismo de la UPV/EHU.

Docencia en Inglés (2006)

Docencia en Francés (2008)

Tutora de prácticas en empresas. Programas de Cooperación Educativa en la empresa CIC nanoGUNE Consolider, San Sebastian.

Cursos: 2008-2009 (3 alumnos)

2009-2010 (4 alumnos)

2010-2011 (3 alumnos)

Tutora de alumnos de nuevo ingreso en la titulación de Física.

Cursos: 2008-2009, 2009-2010, 2010-2011

Evaluación positiva de 2 sexenios de investigación.

Asociada del Donostia International Physics Center (DIPC)

Reconocimiento de créditos docentes por actividades investigadoras realizadas en los cursos: 2005/2006

2006/2007

2007/2008

2008/2009

2009/2010

2010/2011

Miembro de la Comisión de Estudios del Grado en Física.	21 Abril 2010 - Actualidad.
Coordinadora del 1 <sup>er</sup> curso del Grado de Física.	21 Abril 2010 -Actualidad.
Miembro de la Junta de la Facultad de Ciencia y Tecnología.	20 Dic 2010-31 Mayo 2011.
Miembro de la Comisión Permanente de la Facultad de Ciencia y Tecnología. UPV/EHU	7 Feb 2011-31 Mayo 2011.
Miembro de la Comisión Académica del Máster Universitario “Física y Tecnología de Materiales”.	2009-2010
Miembro de la Comisión para el elaboración del plan docente del Máster Universitario “Física y Tecnología de Materiales”.	2009-2010

Organización y participación en las Jornadas de Puertas Abiertas de la Facultad de Ciencia y Tecnología. 2003, 2004, 2009, 2010, 2011 y 2012.

Participación en la elaboración del Diccionario Enciclopédico Elhuyar de Ciencia y Tecnología “Zientzia eta Teknologia Hiztegia”. Editorial Fundación Elhuyar, ISBN: 978-84-92457-00-7

Participación en el Programa Campus Científico de Verano 2011 organizado por el MEC y FECYT, desarrollado en la UPV/EHU en el marco del Proyecto Euskampus. Julio 2011.

Monitora de demostraciones de Física en la VIII, IX, X y XI Semana de la Ciencia, la Tecnología y la Innovación. 2008, 2009, 2010, 2011.

Participación en el programa “Actividades Prácticas dirigidas al alumnado de bachillerato” promovido por la UPV/EHU. 2008/2009, 2009/2010, 2010/2011 y 2011/2012.

Participación en el programa “Física en Acción - Fisikaz Blai”. 2009, 2010, 2011 y 2012.

Coordinadora del programa “Física en Acción - Fisikaz Blai”. 2010 y 2011.

	Lee	Escribe	Habla
INGLÉS	C	C	C
FRANCÉS	C	C	C
EUSKERA	C	C	C
ALEMÁN	R	R	R

## ***II. PROYECTO DOCENTE***

- ⇒ Física General
- ⇒ Técnicas Experimentales I



# *Datos Generales*

Asignatura	Física General
Centro	Facultad de Ciencia y Tecnología
Titulación	Grado en Física (Módulo: Conceptos básicos)
	Grado en Ingeniería Electrónica (Módulo: Fundamentos Científicos para la ingeniería)
	Grado en Matemáticas (Módulo: Física)
Curso	Primero
Tipo	Básica de rama
Duración	Anual
ECTS	12

# Competencias de la asignatura

CA1	Manejar las magnitudes físicas, distinguiendo entre magnitudes escalares y vectoriales, y asimilar conceptos como el de orden de magnitud y empezar a utilizar las aproximaciones como herramienta imprescindible en muchos campos.
CA2	Ser capaces de interpretar las leyes y principios básicos de la Física, esenciales para comprender la naturaleza de los fenómenos físicos.
CA3	Relacionar las leyes y principios de la Física, aplicándolos a los diferentes problemas que se plantean.
CA4	Desarrollar determinadas técnicas de resolución de problemas, ejercitándose de este modo en la valoración de los resultados obtenidos.
CA5	Establecer relaciones abiertas y comunicativas entre los estudiantes y el profesor, de modo que el estudiante reflexione y discuta las ideas y conocimientos adquiridos, tanto con los demás estudiantes, como con el profesor.
CA6	Adoptar una actitud favorable hacia el aprendizaje de la asignatura mostrándose proactivo, participativo y con espíritu de superación ante las dificultades del aprendizaje.

# *Metodología*

## ⇒ Labor docente:

- Transmisión de conocimientos
- Capacidad crítica
- Adquisición de metodología científica

## ⇒ Depende de:

- Profesorado
- Medios y condiciones
- Número alumnos, preparación previa y preconceptos

## ⇒ Contenidos condicionados por:

- Quién lo va a transmitir
- A quién
- Cómo
- Evaluación del rendimiento y capacitación

## ⇒ Recursos pedagógicos

- Clases magistrales
- Prácticas de Aula
- Seminarios
  - Prácticas de ordenador con *python*
- Tutorías
- Comunicación online (email y plataforma *Moodle*)
  - Calendario
  - Auto-tests online
  - Foros
  - Enlaces
  - Ficheros

File Edit View History Bookmarks Tools Help

Ikastaroa: Fisika Orokorra ( 31 )

moodle3.ehu.es/course/view.php?id=939&sesskey=

EHU ZTF es.arXiv gmail Dictio FOT

### Fisika Orokorra ( 31 )

moodle 2011-12 ▶ 310\_GFISIC30\_26637\_31

**Partaideak**

Partaideak

**Jarduerak**

Fitxategiak  
Foroak  
Galdetegiak

**Foroetan bilatu**

Bilaketa aurreratu?

**Kudeaketa**

Kalifikazioak  
Profila

**Nire ikastaroak**

Fisika Orokorra ( 31 )  
Teknika  
Esperimentalak I ( 31 )  
Fisika Orokorra ( 31 )  
Metodos  
computacionales en  
fisica del estado solido ( 01 )  
Teknika  
Esperimentalak I ( 32 )  
Teknika  
Esperimentalak I ( 32 )  
Ikastaro guztiak ...

### FISIKA OROKORRA ( 31 )

moodle 2011-12 ▶ 310\_GFISIC30\_26637\_31

**Partaideak**

Partaideak

**Jarduerak**

Fitxategiak  
Foroak  
Galdetegiak

**Foroetan bilatu**

**Ikastaroaren edukia**

## FISIKA OROKORRA. 1. maila

Fisikako Gradua.  
Ingenieritza Elektronikoko Gradua.

**1. lauhilekoa**

Irakaslea: Idoia G. de Gurtubay

### FISIKA OROKORRA. 1. maila

Fisikako Gradua.  
Ingenieritza Elektronikoko Gradua.

#### 1. lauhilekoa

- Irakaslea: Idoia G. de Gurtubay
- Bulegoa: CD3.P2.2
- eposta: idoia.gurtubay@ehu.es
- Tutoretza orduak:
  - Astelehena: 14:00-17:00
  - Asteartea: 10:45-12:15
  - Asteazkena: 11:00-12:30

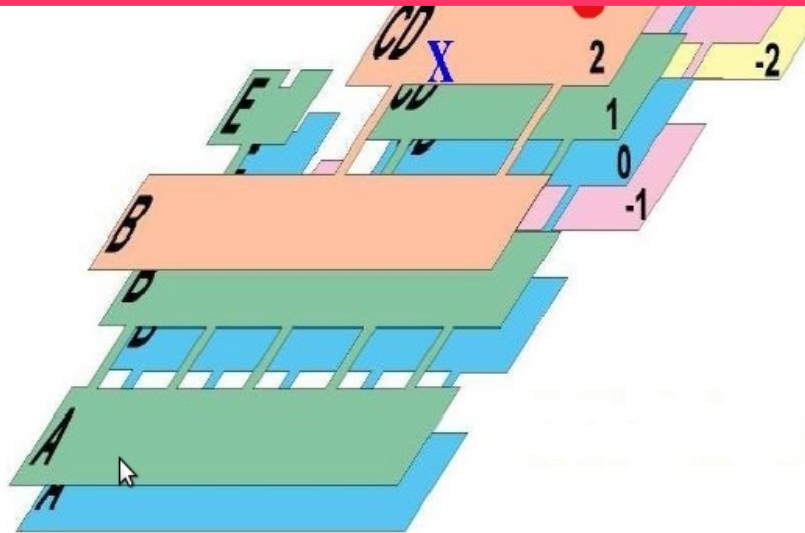
#### 2. lauhilekoa

- Irakaslea: Jon Sáenz Agirre
- Bulegoa: CD3.P2.21
- eposta: jon.saenz-abildua@ehu.es
- Tutoretza orduak:
  - Asteartea: 12:00-13:00 eta 14:45-15:45
  - Asteazkena: 9:30-10:30, 12:00-13:00 eta 14:45-15:45
  - Osteguna: 9:30-10:30

Berrien Foroa

Irakasgaiaren fitxa

**OHARRA:** Eskolan erabiltzen diren aurkezpenek ez dute inolaz ere testu-liburu bat ordezkatzeko. Erabili itzazu eta jaitsi itzazu orrialde honetatik zure ardurapean.



CRYST

da: Student (Nire ohiko rolera itzuli)

Nire ohiko rolera itzuli

zken berriak

gutegia

2012(e)ko martxoa

Al	Ar	Az	Og	Or	Lr	Ig
			1	2	3	4
5	6	7	8	9	10	11
12	13	14	15	16	17	18
19	20	21	22	23	24	25
26	27	28	29	30	31	

**Ekitaldi-motak**

Orokorra Ikastaroa  
Taldea Erabiltzailea

**Datozen ekitaldiak**

Ez dago ekitaldirik laster

Joan egutegira...  
Ekitaldi berria...

**Duela gutxiko aktibitatea**

Noiztik martxan: osteguna, 2012(e)ko martxoa(r)en 1(a)n, 19:35(e)tan

Duela gutxiko aktibitatearen txosten osoa

Ez dago ezer berririk aurreko bisitatik

Ikastaroa: Fisika

File Edit View History Bookmarks Tools Help

Ikastaroa: Fisika Orokorra ( 31 )

moodle3.ehu.es/course/view.php?id=939&sesskey=vafuK8QNoK&switchrole=5

EHU ZTF es.arXiv gmail Dictio FOTOK weather MOO

2012ko Urriaren 17ko azkenetara.

**1 0. gaia: Sarrera**

Zer da Fisika? Partikulak eta elkarrekintzak. Fisikako legeen egituren hierarkia eta materiaren agregazio-egoerak.

Gardenkiak (Sarrera)

**2 1. gaia: Magnitude fisikoak. Bektoreak**

Magnitude eskalarak eta bektorialak. Unitateak. Analisi dim

1. gaiko gardenkiak

1. gaiko ariketak

1. gaiko galdetegia

**3 2. gaia: Zinematika**

Abiadura eta azelerazioa: osagai intrintsekoak. Higidura planoan. Higidura erlatiboa. Galileo-ren transformazioa. Biratzen duten erreferentzia sistemak

a) Zinematika

2. gaiko gardenkiak. Zinematika.

2. gaiko ariketak eta emaitzak. Zinematika.

Zinematikako testa

b) Higidura erlatiboa

2. gaiko gardenkiak. Higidura erlatiboa.

Higidura erlatiboko ariketak.

Higidura erlatiboko testa

**4 3. gaia: Partikularen dinamika**

Newton-en legeak. Momentu lineala. Erlatibitatearen printzipioa. Momentu angeluarra: indar zentralak. Lana eta energia. Indar kontserbakorrak eta energia potentziala. Eremu eskalar baten gradienteak. Energiaren kontserbazioaren printzipioa.

a) Indarrak

3. gaiko gardenkiak. Indarrak

Dinamikako ariketak (Indarrak) eta emaitzak

## 3 2. gaia: Zinematika

Abiadura eta azelerazioa: osagai intrintsekoak. Higidura duten erreferentzia sistemak

### a) Zinematika

- 2. gaiko gardenkiak. Zinematika.
- 2. gaiko ariketak eta emaitzak. Zinematika.
- Zinematikako testa

### b) Higidura erlatiboa

- 2. gaiko gardenkiak. Higidura erlatiboa.
- Higidura erlatiboko ariketak.
- Higidura erlatiboko testa

## 4 3. gaia: Partikularen dinamika

## ⇒ Recursos pedagógicos

- Clases magistrales
- Prácticas de Aula
- Seminarios
  - Prácticas de ordenador con *python*
- Tutorías
- Comunicación online (email y plataforma *Moodle*)
  - Calendario
  - Auto-tests online
  - Foros
  - Enlaces
  - Ficheros
- Prácticas de laboratorio (Técnicas Experimentales I)

## ⇒ Distribución por modalidades docentes

### Actividades presenciales (h)

	1 <sup>er</sup> cuatrimestre	2 <sup>o</sup> cuatrimestre
Clases magistrales	36	36
Prácticas de aula	21	21
Seminarios	2	4

### Actividades no presenciales (h)

	1 <sup>er</sup> cuatrimestre	2 <sup>o</sup> cuatrimestre
Estudio de teoría	54	54
Preparación de problemas Auto-test online	31.5	31.5
Realización de prácticas de ordenador Preparación de exposición	3	6



# Evaluación

Instrumento	Valor	Competencia evaluada
Auto-test online	15%	CA1, CA2, CA3, CA5, CA6
Controles	15%	CA1, CA2, CA3, CA4
Prácticas de ordenador	10%	CA3 CA4, CA5, CA6
Examen	60%	CA1, CA2, CA3, CA4

- ⇒ Nota mínima en el examen: 4
- ⇒ Si los auto-tests reducen la nota promedio no se tendrán en cuenta y el examen valdrá 75%
  - Condición: Haber realizado al menos 75% de los tests y haber obtenido un promedio superior a 5.

# Contenidos

## I. INTRODUCCIÓN (0.5 ECTS)

- |   |                                  |
|---|----------------------------------|
| 1 | Naturaleza y método de la Física |
| 2 | Magnitudes Físicas y vectores    |

## II. MECÁNICA (5.5 ECTS)

- |    |                                        |
|----|----------------------------------------|
| 3  | Cinemática del punto material          |
| 4  | Movimiento relativo                    |
| 5  | Dinámica del punto material            |
| 6  | Trabajo y energía                      |
| 7  | Dinámica de los sistemas de partículas |
| 8  | Dinámica del sólido rígido             |
| 9  | Interacción gravitatoria               |
| 10 | Fluidos                                |
| 11 | Movimiento oscilatorio                 |
| 12 | Movimiento ondulatorio                 |

## III. ELECTROMAGNETISMO (6.0 ECTS)

- |    |                                                         |
|----|---------------------------------------------------------|
| 13 | Interacción electrostática                              |
| 14 | Materiales conductores en campos electrostáticos        |
| 15 | Corriente eléctrica.<br>Circuitos de corriente continua |
| 16 | Interacción magnética                                   |
| 17 | Campos electromagnéticos dependientes del tiempo        |
| 18 | Ondas electromagnéticas                                 |
| 19 | Óptica                                                  |

## I. INTRODUCCIÓN (0.5 ECTS)

### Tema 1: Naturaleza y método de la Física

0.1 ECTS

Qué es la Física? El método científico. Partículas e interacciones. Estructura de las leyes físicas, simetría y leyes de conservación. El mundo material: estados de agregación de la materia.

### Tema 2: Magnitudes físicas y vectores

0.4 ECTS

Magnitudes físicas. Escalares y vectores. Magnitudes fundamentales y derivadas. Ecuación de dimensiones. Análisis dimensional. Órdenes de magnitud y cifras significativas. Vectores libres. Operaciones con vectores libres: adición, producto de un vector por un escalar, producto escalar, producto vectorial, producto mixto, doble producto vectorial. Sistemas de coordenadas y componentes de un vector. Triedro directo e inverso. Campos escalares y vectoriales. Ejemplos. Derivada de un vector respecto de un escalar.

## II. MECÁNICA (5.5 ECTS)

### Tema 3: Cinemática del punto material

0.6 ECTS

Sistemas de referencia. Posición, velocidad y aceleración de una partícula. Movimiento con aceleración constante. Componentes intrínsecas de la velocidad y de la aceleración. Movimiento circular. Movimiento curvilíneo en el plano. Coordenadas polares. Velocidad radial y areolar.

### Tema 4: Movimiento relativo

0.5 ECTS

Sistemas de referencia en movimiento relativo con velocidad constante. Transformación de Galileo. Sistemas de referencia en movimiento relativo de rotación. Aceleración de Coriolis. Ejemplos. Ecuaciones de transformación de la velocidad y de la aceleración generales.

### **Tema 5: Dinámica del punto material**

**0.6 ECTS**

Leyes de Newton. Fuerzas de contacto: reacción normal y resistencia al deslizamiento. Fuerzas a distancia. Resolución de las ecuaciones del movimiento bajo distintos tipos de fuerzas: Fuerzas constantes, fuerza ejercida por un muelle, fuerza de rozamiento proporcional a la velocidad. Momento angular. Momento de una fuerza respecto a un punto. Fuerzas centrales. Conservación del momento angular. Movimiento de una partícula sometida a una fuerza central. Sistemas de referencia no inerciales. Fuerzas de inercia. La Tierra como sistema de referencia. El péndulo de Foucault.

### **Tema 6: Trabajo y energía**

**0.6 ECTS**

Trabajo de una fuerza. Potencia. Trabajo y energía cinética. Fuerzas conservativas. Energía potencial. Gradiente de un campo escalar. Conservación de la energía mecánica. Energía y equilibrio. Equilibrio estable e inestable. Fuerzas no conservativas.

### **Tema 7: Dinámica de los sistemas de partículas**

**0.6 ECTS**

Fuerzas internas y externas. Ecuaciones del movimiento. Conservación del momento lineal. Centro de masa. Sistema de referencia del centro de masa. Descripción del movimiento del centro de masa del sistema. Momento angular. Conservación del momento angular. Trabajo realizado por las fuerzas internas y externas. Energía cinética. Fuerzas internas conservativas. Energía potencial interna. Teorema de conservación de la energía. Energía propia. Fuerzas impulsivas y de impacto. Colisiones. Leyes de conservación. Experimentos en aceleradores. Creación de partículas. Sistemas de masa variable.

### **Tema 8: Dinámica del Sólido Rígido**

**0.6 ECTS**

Energía cinética de rotación. Ejes principales y momentos inercia. Cálculo de momentos de inercia. Fórmula de Steiner y teorema de los ejes perpendiculares. Radio de giro. Dinámica del sólido rígido: Momento angular. Teorema del momento angular. Energía. Estudio de casos particulares: rotación alrededor de un eje fijo, movimiento de rodadura. Condiciones de equilibrio de un cuerpo rígido.

### **Tema 9: Interacción gravitatoria**

**0.5 ECTS**

Introducción histórica. Leyes de Kepler. Ley de la gravitación universal. Experimento de Cavendish. Campo y potencial gravitatorio. Ley de Gauss. Energía potencial gravitatoria. El problema de dos cuerpos. Reducción al problema equivalente de un solo cuerpo. Masa reducida. Clasificación de las órbitas. Movimiento orbital: órbitas circulares y órbitas elípticas. Excentricidad y energía.

### **Tema 10: Fluidos**

**0.3 ECTS**

Propiedades y clasificación de los fluidos. Hidrostática: Ecuación fundamental de la hidrostática. Flotación, empuje y Principio de Arquímedes. Hidrodinámica: Flujo de un campo vectorial y ecuación de continuidad. Ecuación de Bernoulli y aplicaciones. Viscosidad. Ley de Poiseuille.

### **Tema 11: Movimiento oscilatorio**

**0.4 ECTS**

El oscilador armónico simple. Ecuación del movimiento. Composición de movimientos armónicos. Ejemplos de osciladores: Resorte lineal. Péndulo simple. Péndulo físico. Péndulo de torsión. Energía del oscilador armónico. Oscilaciones amortiguadas. Clases de amortiguamiento. Oscilaciones forzadas. Resonancia.

### **Tema 12: Movimiento ondulatorio**

**0.5 ECTS**

Descripción matemática de la propagación de una perturbación. La ecuación de ondas. Ondas en una dimensión. Ondas transversales en una cuerda. Ondas longitudinales en una barra metálica. Ondas armónicas. Magnitudes fundamentales. Superposición. Interferencia de ondas armónicas. Ondas estacionarias en una cuerda y en una columna de aire. Modos de vibración. Efecto Doppler.

#### **Tema 13: Interacción electrostática**

**0.9 ECTS**

Introducción. Carga eléctrica. Conservación y cuantificación de la carga eléctrica. Estructura del átomo. Ley de Coulomb. Campo y potencial eléctrico. Cálculo del campo y potencial eléctricos debidos a distintas distribuciones de carga. Líneas de campo y superficies equipotenciales. Flujo del campo eléctrico. Ley de Gauss. Aplicaciones. Energía de una distribución de cargas. Dipolo eléctrico. Momento dipolar. Acción del campo eléctrico sobre un dipolo. Clasificación de los materiales por su comportamiento frente a un campo eléctrico. Conductores y aislantes. Materiales dieléctricos en campos electrostáticos. Polarizabilidad de un medio dieléctrico. Polarización. Densidades de carga de polarización.

#### **Tema 14: Materiales conductores en campos electrostáticos**

**0.4 ECTS**

Campo y potencial eléctricos en el interior de un conductor en equilibrio. Reparto de las cargas. Campo en la superficie de un conductor. Poder de las puntas. Capacidad de un conductor aislado. Condensadores. Capacidad. Energía. Asociación de condensadores: capacidad equivalente y energía. Densidad de energía asociada al campo eléctrico. Efecto de un dieléctrico sobre la capacidad de un condensador.

#### **Tema 15: Corriente eléctrica. Circuitos de corriente continua**

**0.9 ECTS**

Corriente y densidad de corriente. Ecuación de continuidad. Corrientes de conducción. Ley de Ohm. Conductividad. Resistencia. Punto de vista microscópico. Modelo de Drude. Fuerza electromotriz. Disipación de energía. Ley de Joule. Combinaciones de resistencias. Leyes de Kirchhoff. Circuitos RC.

### III. ELECTROMAGNETISMO (6.0 ECTS)

#### Tema 16: Interacción magnética

1.0 ECTS

Introducción. Fuerza magnética sobre una carga en movimiento. Movimiento de una partícula cargada en un campo magnético. Aplicaciones: selector de velocidades, espectrómetro de masas, ciclotrón. Acción de un campo magnético sobre una corriente eléctrica. Momento dipolar magnético. Momento sobre una espira en un campo magnético. Campo magnético creado por una carga en movimiento. Campo creado por una corriente eléctrica: ley de Biot y Savart. Ejemplos. Fuerzas entre corrientes. Ley de Ampère. Ejemplos. Ley de Gauss para el campo magnético. Campo magnético en la materia. Imanación. Susceptibilidad y permeabilidad magnéticas. Diamagnetismo, paramagnetismo y ferromagnetismo.

#### Tema 17: Campos electromagnéticos dependientes del tiempo

1.2 ECTS

Introducción. Flujo de un campo magnético. Ley de Faraday-Henry. Ley de Lenz. Aplicaciones. Autoinducción. Inducción mutua. Energía del campo electromagnético. Oscilaciones electromagnéticas: circuitos RLC. Resonancia. Circuitos de corriente alterna. Corriente de desplazamiento de Maxwell. Ley de Ampère-Maxwell. Ecuaciones de Maxwell.

#### Tema 18: Ondas electromagnéticas

0.7 ECTS

Obtención de la ecuación de ondas a partir de las ecuaciones de Maxwell. Velocidad de las ondas electromagnéticas. Ondas electromagnéticas planas. Carácter transversal de las ondas. Relaciones entre los campos eléctrico y magnético. Polarización. Energía y momento de las ondas electromagnéticas. Vector de Poynting. Fuentes de ondas electromagnéticas. Propagación de ondas electromagnéticas en la materia: dispersión. Espectro de la radiación electromagnética.

#### Tema 19: Óptica

0.6 ECTS

Teoría ondulatoria y corpuscular. Principio de Huygens. Reflexión y refracción. Reflexión total. Aproximación geométrica. Rayo de luz. Principio de Fermat. Espejos y lentes. Diagramas de rayos. Combinaciones de lentes. Instrumentos ópticos: Cámara fotográfica. Microscopio. Telescopio. Ojo humano.

## Prácticas de ordenador con *python*

PRÁCTICAS DE ORDENADOR CON PYTHON	
1	Ejemplo. Movimiento bajo una fuerza constante
2	Péndulo de Foucault
3	Oscilador armónico de dos dimensiones. Diagramas de Lissajous
4	Oscilador amortiguado
5	Oscilador forzado
6	Movimiento bajo una fuerza disipativa
7	Circuito RLC en serie
8	Circuito RC
9	Circuito RL
10	Circuito LC



Asignatura	Técnicas Experimentales I
Centro	Facultad de Ciencia y Tecnología
Titulación	Grado en Física (Módulo: Técnicas Experimentales)
	Grado en Ingeniería Electrónica (Módulo: Fundamentos Científicos para la ingeniería)
Curso	Primero
Tipo	Básica de rama
Duración	Cuatrimstral (2º)
ECTS	6.0

## TÉCNICAS EXPERIMENTALES I (6.0 ECTS)

<b>INTRODUCCIÓN</b>		Cálculo de errores y tratamiento de datos. Manejo de programas gráficos. Presentación de informes.
<b>INSTRUMENTOS DE MEDIDA</b>		Nonius y micrómetro, fuentes de alimentación, osciloscopio, multímetro, componentes eléctricos.
<b>COMPLEMENTOS TEÓRICOS</b>		Teoría de circuitos
<b>PRÁCTICAS</b>	1	El péndulo físico. Medida de $g$ .
	2	Movimiento armónico simple. Ley de Hooke.
	3	Plano inclinado: oscilaciones. Muelles en serie y en paralelo.
	4	Momento de inercia
	5	Medida de la velocidad del sonido. Tubo de resonancia.
	6	Corriente continua I. Resistencia interna de una fuente.
	7	Corriente continua II. Curva característica de una lámpara
	8	Instrumentos de medida. Descarga de un condensador.
	9	Corriente alterna. Circuito RLC. Manejo del osciloscopio.
	10	Corriente inducida en un solenoide. El transformador.

# Bibliografía

- ➔ TIPLER P. A., MOSCA G.,  
*Física para la ciencia y la tecnología* 6ª ed.,  
Editorial Reverté, Barcelona, 2010.
- ➔ FISHBANE, P. M., GASIOROWICZ, S., THORNTON, S. T.,
  - *Physics for Scientists and Engineers*, 3ª ed.,  
Addison-Wesley, 2003.
  - *Fisika zientzialari eta ingeniariarentzat*.  
Servicio editorial de la UPV/EHU, 2008.
- ➔ YOUNG H. D., FREEDMAN R. A.,  
*Sears Zemansky Física Universitaria*, 12ª ed.,  
Addison-Wesley, 2009.
- ➔ AGIRREGABIRIA J.M., DUOANDIKOETXEA A., ENSUNZA  
M., ETXEBARRIA J.R., EZENARRO O., PITARKE J.M.,  
TRANCHO A. Y UGALDE P.  
*Fisika Orokorra* 2ª ed. UEU, Bilbao, 2003.

- ➔ HERNÁNDEZ J., TOVAR J.,  
*Problemas de Física: mecánica*,  
Universidad de Jaén, 2009.
- ➔ BURBANO DE ERCILLA S., BURBANO GARCÍA E.,  
*Problemas de Física*, 32<sup>a</sup> ed.,  
Editorial Tébar, Madrid 2006.
- ➔ ENSUNZA M., ETXEBARRIA J.R., EZENARRO O., PITARKE  
J.M., UGALDE P. Y ZABALA N.,  
*Fisika Orokorra, Ariketak*,  
UEU, Iruñea 1989.
- ➔ HALPERN, A.,  
*3000 Solved Problems in Physics*.  
Schaum's Solved Problems Series, Mc Graw Hill.

### ***III. PROYECTO INVESTIGADOR***

- ➔ Cálculos de Monte Carlo cuántico de la función de respuesta de sólidos reales
- ➔ Superconductividad inducida por presión

# *Cálculos de Monte Carlo cuántico de la función de respuesta de sólidos reales*

## ⇒ MOTIVACIÓN

- TDDFT: formalmente exacta. Aproximar  $f_{xc}$

- DMC:

- $V$  perturbativo
- Punto  $k$
- (Punto  $k'$ )



Energía  
-Reoptimización de la f.o  
-Cálculo DMC  
Segunda derivada de la E

## ⇒ OBJETIVO

Calcular la función de respuesta de sólidos reales mediante QMC. En particular: semiconductores.

## ➡ ANTECEDENTES Gaudoin & Pitarke, PRB81, 245116(2010)

Extensión de HFS a la 2ª derivada de E → Algoritmo DMC para calcular la función de respuesta estática en la aproximación *frozen node* (*fn*). Diagonal y no diagonal en un solo cálculo DMC sin reoptimización ni derivadas numéricas.

Aplicación: GEH no polarizado varias densidades (*fn*)

1  $X_0^{fn} < X_0 \rightarrow X^{fn} < X$  (Respuesta QMC *fn* < Respuesta real)

$$-f_{xc}(k) = \frac{1}{X(k)} - \frac{1}{X_{RPA}(k)} = \frac{1}{X(k)} - \frac{1}{X_0(k)} + v_c(k)$$

2 Comparación con Moroni 95 →  $f_{xc} = f_{xc}^{fn}$

3  $f_{xc}$  no afectado por los efectos de tamaño finito (Moroni 95)

4 Extracción de contribución xc:

$$\boxed{X_0^{fn}; X^{fn}} \rightarrow f_{xc}^{fn}$$

$$\boxed{f_{xc}^{fn} = f_{xc}}$$

$$\boxed{f_{xc}; X_0} \rightarrow X$$

## ➡ METODOLOGÍA

- 1 DMC: sólido real, tamaño finito, fn  
(Orbitales Kohn-Sham, correlación, optimización)
  - 2 Análisis exhaustivo de  $f_{xc}$
  - 3 Respuesta Kohn-Sham
- Aplicación: SILICIO

### Espectro óptico

- Reining (2002): BSE+TDDFT
  - Energía KS corregida con shift GW
  - Exigente
- Nazarov (2011): MGGA
  - Mejora el gap de KS
  - Estrictamente TDDFT

$$\boxed{X_0^{fn}; X^{fn}} \rightarrow f_{xc}^{fn}$$

$$\boxed{f_{xc}^{fn} = f_{xc}}$$

$$\boxed{f_{xc}; X_0} \rightarrow X$$

$$q \rightarrow 0, f_{xc} \rightarrow \alpha/q^2; \alpha = -0.2$$

$$q \rightarrow 0, f_{xc} \rightarrow \alpha/q^2$$

$\alpha$



## ➞ COLABORACIONES

- Prof. J.M. Pitarke (UPV/EHU)
- Dr. R. Gaudoin (Imperial College)
- Prof. R. J. Needs (Univ. Cambridge)

## ➞ RECURSOS

- Centro cálculo del Donostia International Physics Center (DIPC)
- Servicio General de Informática Aplicada a la Investigación de la UPV/EHU.

# ***Superconductividad inducida por presión***

## ➔ MOTIVACIÓN

- Propiedades físicas: estructura y distancias interatómicas
- Avances experimentales en medidas bajo presión.

## ➔ OBJETIVO

Predecir y conocer en profundidad el fundamento físico que permite explicar las anomalías observadas en las propiedades estructurales, ópticas, electrónicas y superconductoras de materiales a altas presiones.

## ⇒ ANTECEDENTES

- Metales ligeros (Li, Ca)
- Hidrógeno. Aleaciones de H.
  - Grupo IV ( $\text{CH}_4$ ,  $\text{SiH}_4$ ,  $\text{GeH}_4$ ,  $\text{SnH}_4$ )
  - Grupo III ( $\text{AlH}_3$ ,  $\text{GaH}_3$ )
- Combinación de metales ligeros:
  - $\text{MgB}_2$ ;  $\text{CaLi}_2$
  - $\text{Be}_2\text{Li}$  (solo miscibles a alta P)

## ➔ METODOLOGÍA

- 1 Caracterización estructural de los materiales bajo P
- 2 Propiedades electrónicas. Función de respuesta
- 3 Propiedades superconductoras y  $T_c$

Algoritmos PSO y genéticos. DFT y TDDFT.

- Aplicación: Aleación LiB (Isovalente al  $MgB_2$ )
  - Estructura hexagonal hasta 70GPa ( $\alpha$ -LiB). [Lazicki (2010)]
  - B-B covalente, conductividad similar, acoplamiento e-ph débil, baja  $T_c$  (si existe). [Rosner (2003)]
  - Estructuras “sandwich-metal”. Favorables a P moderadas [Kolmogorov (2006)]
    - Fonones similares a  $MgB_2$  pero acoplamiento e-ph menor.  
 $T_c$  intermedia. [Calandra (2006)]
    - Fase no caracterizada experimentalmente.

## ➡ COLABORACIONES

- Prof. A. Bergara, Prof. A. Eiguren (UPV/EHU)
- A. Suarez, J. Ibañez (UPV/EHU)
- Dr. M. Martínez-Canales (University College London)
- Dr. I. Errea (Univ. Pierre et Marie Curie)
- Dr. B. Rousseau (Univ. of Montreal)
  
- Prof. Y. Ma (Univ. of Jiling)
- Prof. A. Oganov (Stony Brook Univ.)
- Prof. R. Hemley (Carnegie Institution)
- Prof. O. Degtyareva, Prof. E. Gregorianz (Univ. of Edinburgh)

## ➡ RECURSOS

- Centro cálculo del Donostia International Physics Center.
- Servicio General de Informática Aplicada a la Investigación de la UPV/EHU.