MEMORIA

presentada por

IDOIA GARCÍA DE GURTUBAY GÁLLIGO

Concurso para la provisión de una plaza de Profesor Titular de Universidad

Plaza del área de conocimiento de Física de la Materia Condensada, convocada por la Universidad del País Vasco/Euskal Herriko Unibertsitatea, por Resolución de 7 de marzo de 2012 (B.O.E. 13 de abril de 2012)

DILIGENCIA

La presente memoria contiene un Curriculum Vitae, un Proyecto Docente y un Proyecto Investigador y se ha redactado para cumplir con los requerimientos del concurso de acceso a la plaza de los Cuerpos Docentes Universitarios con número de referencia TUC8/1-D00063-13 y correspondiente al Cuerpo de Profesores Titulares de Universidad en el área de conocimiento de Física de la Materia Condensada convocada por el Rectorado de la Universidad del País Vasco/Euskal Herriko Unibertsitatea, UPV/EHU, de acuerdo con la resolución del 7 de marzo de 2012 y publicada en el BOE del 13 de abril de 2012. La plaza está adscrita al Departamento de Física de la Materia Condensada de la Facultad de Ciencia y Tecnología, siendo su perfil lingüístico bilingüe (castellanoeuskera), su régimen de dedicación completo y las actividades docentes e investigadoras a realizar "Física General".

La abajo firmante, Idoia García de Gurtubay Gálligo, con DNI 16.063.783-P, se responsabiliza de la veracidad de los datos contenidos en el Curriculum Vitae incluido en esta memoria y se compromete a aportar en su caso las pruebas documentales que le sean requeridas.

Leioa, 15 de junio de 2012

Fdo: Idoia García de Gurtubay Gálligo

Índice general

I	Cu	rriculu	ım Vitae	1			
	1.	Datos l	Personales	2			
	2.	Titulac	ión Académica	3			
	3.	Puesto	s docentes y de investigación	4			
	4.		dad docente desempeñada	6			
	5.	Innova	ción Docente	9			
	6.	Proyec	tos Docentes financiados	11			
	7.		irigidas	12			
		7.1.	Tesis de Máster	12			
		7.2.	Tesis Doctorales	12			
	8.	Publica	aciones	13			
		8.1.	Artículos en revistas internacionales	13			
		8.2.	Otras publicaciones	14			
	9.	Proyec	tos de Investigación financiados	15			
	10.	Contrib	buciones a Congresos y Reuniones científicas	17			
		10.1.	Comunicaciones orales	17			
		10.2.	Comunicaciones tipo poster	18			
	11.	Estanc	ias en centros de investigación extranjeros	22			
	12.	\mathcal{E}					
	13.	Cursos	recibidos	25			
		13.1.	Cursos y seminarios de especialización	25			
		13.2.	Otros cursos y seminarios	26			
	14.	Becas	y ayudas recibidas	27			
		14.1.	Becas de convocatoria oficial predoctoral	27			
		14.2.	Becas de convocatoria oficial postdoctoral	27			
		14.3.	Otras becas y ayudas	27			
	15.	Premio	os recibidos	29			
	16.	Otros r	néritos	30			
		16.1.	Docentes	30			
		16.2.	Investigación	30			
		16.3.	Gestión	31			
		16.4.	Proyección a la sociedad	32			
		16.5.	Idiomas	33			
II	Pr	ovecto	Docente	34			
		5,500					
1.	Introducción						
	1.1.	Marco	legal	35			
	1.2	Condic	cionantes del Provecto	37			

Índice general III

2.	El p	lan docente en el EEES: Bolonia	39			
	2.1.	1. Introducción				
		La nueva estructura de los estudios universitarios	40			
		2.2.1. "Física General" en la Facultad de Ciencia y Tecnología de la				
		UPV/EHU	42			
	2.3.	Competencias	44			
	2.4.	Metodología	48			
		2.4.1. Sobre el alumnado	48			
		2.4.2. Sobre el profesor	49			
		2.4.3. El método docente	50			
	2.5.	La evaluación	58			
	2.6.	Contenidos	62			
		2.6.1. Programa de teoría: Física General	62			
		2.6.2. Programa de prácticas: Técnicas Experimentales I	79			
	2.7.	Bibliografía	82			
		2.7.1. Libros de teoría recomendados a los estudiantes	82			
		2.7.2. Bibliografía de profundización	83			
		2.7.3. Libros de problemas	84			
		2.7.4. Revistas y direcciones de internet	8.			
		 i experiencia con la docencia adaptada al EEES l. Cursos piloto en la Licenciatura en Química: 2007-2010 2. Primer año de la implantación del "Plan Bolonia" en el Grado de Física, Grado de Matemáticas y Grado de Ingeniería Electrónica: 2010-2011 				
	4.3.	En la Universidad de Cambridge: 2004-2006	94			
	4.4.	Conclusiones	9:			
II	I P	royecto investigador	96			
1.	Anto	Antecedentes: Actividad investigadora hasta la actualidad				
		Etapa predoctoral	97			
		1.1.1. Funciones de respuesta en sólidos reales	9			
		1.1.2. Vidas medias de electrones calientes en metales nobles				
		1.1.3. Poder de frenado de sólidos reales				
	1.2.	Etapa postdoctoral				
		1.2.1. Cálculos de Monte Carlo cuántico				
	1.3.	Tras la etapa postdoctoral				
		1.3.1. Poder de frenado en superficies				
		1.3.2. Cálculos de Monte Carlo cuántico. Energía de interacción y factor	•			
		de estructura	104			
		1.3.3. Hidruros de metales ligeros a altas presiones				

Índice general IV

Trabajo futuro					
2.1.	Cálculos de Monte Carlo cuántico de la función de respuesta de sólidos				
	reales	107			
2.2.	Superconductividad inducida por presión	112			
hlingr	าสท์ล	120			
	2.1.2.2.	Trabajo futuro 2.1. Cálculos de Monte Carlo cuántico de la función de respuesta de sólidos reales			

Parte I Curriculum Vitae

1. Datos Personales

Nombre y Apellidos : Idoia García de Gurtubay Gálligo

DNI : 16.063.783-P

Fecha y Lugar de Nacimiento : 15 de Junio de 1976. Bilbao (Bizkaia)

Domicilio : Elizondo 1 – 48991 Algorta-Getxo (Bizkaia)

Teléfono : 656739397

Situación Actual : Profesora Agregada de Universidad

Departamento de Física de la Materia Condensada

Facultad de Ciencia y Tecnología

Universidad del País Vasco/Euskal Herriko Unibertsitatea

Teléfono : 946012490 FAX : 946013500

Email : idoia.gurtubay@ehu.es

Fecha de resolución de acreditación : 14 de Abril de 2011

2. Titulación Académica

Licenciada en Ciencias Físicas. (Especialidad Física del Estado Sólido).
 Universidad del País Vasco/Euskal Herriko Unibertsitatea, UPV/EHU.
 Junio 1999.

Grado de Licenciatura en Ciencias Físicas.

Universidad del País Vasco/Euskal Herriko Unibertsitatea, UPV/EHU.

Modalidad Tesina: "Metal nobleetako kitzikapen elektronikoak: Urrearen adibidea"

Director: Prof. Dr. J. M. Pitarke de la Torre

Fecha: Noviembre 2000 Calificación: Sobresaliente.

■ **Diploma de Estudios Avanzados (D.E.A)** en Ciencia y Tecnología de Materiales. Universidad del País Vasco/Euskal Herriko Unibertsitatea, UPV/EHU. Noviembre 2001.

Doctora en Ciencias Físicas.

Facultad de Ciencia y Tecnología.

Universidad del País Vasco/Euskal Herriko Unibertsitatea, UPV/EHU.

Título Tesis: Electronic Excitations in Solids: Dynamical Structure Factor

and Quasiparticle Lifetimes.

Solidoetako Kitzikapen Elektronikoak: Egitura Faktore Dinamikoa

eta Kuasipartikulen Bizidenborak.

Directores: Prof. Dr. Jose María Pitarke de la Torre,

Prof. Dr. Pedro Miguel Echenique Landiribar.

Fecha: 15 Octubre 2004.

Calificación: Sobresaliente Cum Laude (por unanimidad).

Tesis publicada en edición digital por el Departamento de Política Lingüística del Gobierno Vasco. ISBN:978-84-8438-131-0

3. Puestos docentes y de investigación

■ **Becaria de Colaboración** (Gobierno Vasco)

Dpto. Física de la Materia Condensada.

Facultad de Ciencia y Tecnología.

Universidad del País Vasco/Euskal Herriko Unibertsitatea, UPV/EHU.

Director: Prof. Gotzon Madariaga Menéndez.

Curso 1998-1999.

■ **Becaria Predoctoral** (Gobierno Vasco)

Dpto. Física de la Materia Condensada.

Facultad de Ciencia y Tecnología.

Universidad del País Vasco/Euskal Herriko Unibertsitatea, UPV/EHU.

Directores: Profs. José María Pitarke de la Torre y Pedro Miguel Echenique Landiribar.

Dedicación completa. 1 Septiembre de 1999 – 30 Septiembre 2003.

■ **Becaria Predoctoral** (Donostia International Physics Center)

Dpto. Física de la Materia Condensada.

Facultad de Ciencia y Tecnología.

Universidad del País Vasco/Euskal Herriko Unibertsitatea, UPV/EHU.

Directores: Profs. José María Pitarke de la Torre y Pedro Miguel Echenique Landiribar.

Dedicación completa. 1 Octubre de 2003 – 15 Octubre 2004.

Profesora Laboral Interina de Universidad

Dpto. Física de la Materia Condensada.

Facultad de Ciencia y Tecnología.

Universidad del País Vasco/Euskal Herriko Unibertsitatea, UPV/EHU.

Dedidación docente parcial. 22 Febrero 2002 – 30 Septiembre 2003.

Profesora Asociada de Universidad

Dpto. Física de la Materia Condensada.

Facultad de Ciencia y Tecnología.

Universidad del País Vasco/Euskal Herriko Unibertsitatea, UPV/EHU.

Dedidación docente parcial. 1 Octubre 2003 – 9 Noviembre 2004

■ **Becaria Postdoctoral** (Gobierno Vasco)

Theory of Condensed Matter Group.

Department of Physics. Cavendish Laboratory.

Universidad de Cambridge, Reino Unido.

Dedicación completa. 1 Noviembre 2004 – 30 Septiembre 2006.

■ Profesora Laboral Interina de Universidad

Dpto. Física de la Materia Condensada.

Facultad de Ciencia y Tecnología.

Universidad del País Vasco/Euskal Herriko Unibertsitatea, UPV/EHU.

Dedidación docente completa. 18 Septiembre 2006 – 30 Mayo 2011

■ Profesora Agregada de Universidad

Dpto. Física de la Materia Condensada.

Facultad de Ciencia y Tecnología.

Universidad del País Vasco/Euskal Herriko Unibertsitatea, UPV/EHU.

Dedidación docente completa. 1 Junio 2011 – actualidad

4. Actividad docente desempeñada

1. Licenciatura. Primer ciclo.

Prácticas de Física General

Primer curso de la Licenciatura en Ciencias Físicas.

Universidad del País Vasco/Euskal Herriko Unibertsitatea, UPV/EHU.

Facultad de Ciencias, Departamento de Física de la Materia Condensada.

Curso: 1999/2000

Fundamentos de Técnicas Experimentales

Primer curso de la Licenciatura en Física.

Universidad del País Vasco/Euskal Herriko Unibertsitatea, UPV/EHU.

Facultad de Ciencias, Departamento de Física de la Materia Condensada.

Cursos: 2000/2001

2001/2002

2002/2003

2003/2004

■ Técnicas Experimentales en Física II

Segundo curso de la Licenciatura en Física.

Universidad del País Vasco/Euskal Herriko Unibertsitatea, UPV/EHU.

Facultad de Ciencias, Departamento de Física de la Materia Condensada.

Cursos: 2001/2002

2002/2003

2003/2004

Física

Primer curso de la Licenciatura en Geología.

Universidad del País Vasco/Euskal Herriko Unibertsitatea, UPV/EHU.

Facultad de Ciencias, Departamento de Física de la Materia Condensada.

Cursos: 2002/2003

2003/2004

2004/2005

Fundamentos de Física

Primer curso de la Licenciatura en Física.

Universidad del País Vasco/Euskal Herriko Unibertsitatea, UPV/EHU.

Facultad de Ciencia y Tecnología, Departamento de Física de la Materia Condensada.

Cursos: 2006/2007

2007/2008 2008/2009 2009/2010

Física I

Primer curso de la Licenciatura en Química.

Universidad del País Vasco/Euskal Herriko Unibertsitatea, UPV/EHU.

Facultad de Ciencia y Tecnología, Departamento de Física de la Materia Condensada.

Cursos: 2006/2007

2007/2008 2008/2009 2009/2010

2. Licenciatura. Segundo ciclo.

Métodos Experimentales I

Cuarto curso de la Licenciatura en Física.

Universidad del País Vasco/Euskal Herriko Unibertsitatea, UPV/EHU.

Facultad de Ciencia y Tecnología, Departamento de Física de la Materia Condensada.

Cursos: 2006/2007

2007/2008 2008/2009 2009/2010

3. Natural Science Tripos

Physics IA

Primer curso de Natural Science Tripos.

Universidad de Cambridge, Reino Unido.

Robinson College.

Curso: 2005/2006

4. Máster

Métodos Computacionales en Física del Estado Sólido.

Master Universitario "Física y Tecnología de Materiales".

Universidad del País Vasco/Euskal Herriko Unibertsitatea, UPV/EHU.

Cursos: 2009-2010

2010-2011 2011-2012

5. Grado

Física General

Primer curso de Grado en Física, Grado en Ingeniería Electrónica y Grado en Matemáticas.

Universidad del País Vasco/Euskal Herriko Unibertsitatea, UPV/EHU.

Facultad de Ciencia y Tecnología, Departamento de Física de la Materia Condensada.

Cursos: 2010-2011

2011-2012

■ Técnicas Experimentales I

Primer curso de Grado en Física, Grado en Ingeniería Electrónica.

Universidad del País Vasco/Euskal Herriko Unibertsitatea, UPV/EHU.

Facultad de Ciencia y Tecnología, Departamento de Física de la Materia Condensada.

Cursos: 2011-2012

5. Innovación Docente

1. Participación en el *programa IBP* (2007) para la implantación del sistema de crédito europeo (ECTS), formando parte del equipo docente encargado del 1º curso de la Licenciatura en Química adaptado a la nueva metodología. Curso 2007-2008.

- 2. Participación en el *programa IBP* (2008) para la implantación del sistema de crédito europeo (ECTS), formando parte del equipo docente encargado del 1º curso de la Licenciatura en Química adaptado a la nueva metodología. Curso 2008-2009.
- 3. Curso "Introducción a Moodle". Facultad de Ciencia y Tecnología, 2007.
- 4. Curso "Elaboración de Plan Docente según criterios ECTS". Vicerrectorado de Calidad e Innovación Docente, UPV/EHU, 2007.
- 5. Miembro de la Comisión de la Titulación de Licenciado en Ciencias Biológicas para la aplicación del Programa IBP. Facultad de Ciencia y Tecnología, 2007.
- 6. Certificado-Diploma de Aptitud Pedagógica (CAP).

Institución: Universidad Complutense de Madrid. 2004.

Duración: 180 horas

7. Curso de perfeccionamiento para profesores que imparten docencia universitaria en Inglés

Título: "Teaching your subject in English"

Institución: Universidad del País Vasco/Euskal Herriko Unibertsitatea, UPV/EHU.

Vicerrectorado de Relaciones Internacionales, 2007.

Duración: 15 horas.

- 8. Cursos de perfeccionamiento de Euskera para profesores que imparten docencia universitaria en Lengua Vasca:
 - a) Título: "Hiztegi batua: Trebakuntza".

Institución: Universidad del País Vasco/Euskal Herriko Unibertsitatea, UPV/EHU, 2003.

Duración: 16 horas.

b) Título: "Euskaltzaindiaren araugintza berria".

Institución: Universidad del País Vasco/Euskal Herriko Unibertsitatea, UPV/EHU,

2008.

Duración: 16 horas.

c) Título: "Euskaltzaindiaren araugintzan sakonduz".

Institución: Universidad del País Vasco/Euskal Herriko Unibertsitatea, UPV/EHU,

2008.

Duración: 16 horas.

d) Título: "EHULKU-ren fitxak: Euskara Zerbitzuaren aholkuak". Institución: Universidad del País Vasco/Euskal Herriko Unibertsitatea, UPV/EHU, 2011.

Duración: 15 horas.

- 9. Asistencia al Seminario de Física Superior. Phywe Systeme. Göttingen, Alemania. 4-8 Julio de 2009.
- 10. Participación en el "Taller de Metodologías Activas ZTF-FCT (Ciencias Experimentales)". Facultad de Ciencia y Tecnología, UPV/EHU, 25 Enero de 2011.
- 11. Curso: "*Trabajo cooperativo mediante la WEB 2.0*". Servicios de Asesoramiento Educativo SAE/HELAZ, UPV/EHU, 9-11 de Junio de 2011. 15 horas.
- 12. Utilización de la *Aulas Virtuales de apoyo a la docencia presencial* para las asignaturas:
 - Física General, grupo 31, Lic. en Física: 2007/2008, 2008/2009, 2009/2010
 - Física I, grupo 31, Lic. en Química: 2007/2008, 2008/2009, 2009/2010
 - Métodos Experimentales I, grupo 31, Lic. en Física: 2009/2010
 - Métodos Computacionales en Física del Estado Sólido. Master en Física y Tecnología de Materiales: 2009/2010, 2010/2011
 - Fisica General, grupo 31A, Grado en Física: 2010/2011, 2011/2012
 - Fisica General, grupo 31A, Grado en Ingeniería Electrónica: 2010/2011, 2011/2012
 - Fisica General, grupo 31B, Grado en Matemáticas: 2010/2011.
 - Técnicas Experimentales I: 2011/2012.

6. Proyectos Docentes financiados

 Título: "Actividades de orientación dirigidas al alumnado de segundo de bachillerato".

Entidad Financiadora: Gobierno Vasco.

Año: 2009.

Responsable: Prof. Dr. Gotzon Madariaga

2. Título: "Física en Acción - Fisikaz Blai"

Ref.: FCT-09-1318

Programa: Convocatoria para Ayudas para el Programa de la Cultura Científica y la Innovación 2009 de la Fundación Española para la Ciencia y la Tecnología (FECYT).

Entidad financiadora: Ministerio de Ciencia e Innovación

Año: 2009.

Responsable: Prof. Dr. Gotzon Madariaga

3. Título: "Actividades de orientación dirigidas al alumnado de segundo de bachillerato".

Entidad Financiadora: Gobierno Vasco.

Año: 2010.

Responsable: Prof. Dr. Gotzon Madariaga

4. Título: "Física en Acción - Fisikaz Blai"

Ref.: FCT-10-988

Programa: Convocatoria para Ayudas para el Programa de la Cultura Científica y la Innovación 2010 de la Fundación Española para la Ciencia y la Tecnología (FECYT).

Entidad financiadora: Ministerio de Ciencia e Innovación

Año: 2010.

Responsable: Prof. Dr. Gotzon Madariaga

7. Tesis dirigidas

7.1. Tesis de Máster

1. Título: "Fases de alta presión en los hidruros de boro"

Autora: Ainhoa Suárez Alcubilla

Fecha: 28 Septiembre 2011

Directores: Idoia García de Gurtubay y Aitor Bergara

Calificación: 9

Máster Universitario en Nuevos Materiales, Universidad del País Vasco/Euskal He-

rriko Unibertsitatea, UPV/EHU.

7.2. Tesis Doctorales

En curso de realización

1. Título: "Superconductividad inducida por la presión en aleaciones de hidrógeno"

Doctoranda: Ainhoa Suárez Alcubilla

Año previsto de defensa: 2015

Directores: Idoia García de Gurtubay y Aitor Bergara

8. Publicaciones

8.1. Artículos en revistas internacionales

- 1. "Dynamic structure factor of gold".
 - I. G. Gurtubay, J. M. Pitarke, I. Campillo, A. Rubio.

Comp. Mater. Sci. 22, 123-128 (2001).

2. "Corrected local-density approximation band structures, linear-response dielectric functions and quasiparticle lifetimes in noble metals".

V. P. Zhukov, F. Aryasetiawan, E. V. Chulkov, I. G. Gurtubay, P. M. Echenique. *Phys. Rev. B* **64**, 195122 (2001).

- 3. "Effects of the crystal structure in the dynamical electron density-response of hcp transition metals".
 - I. G. Gurtubay, Wei Ku, J. M. Pitarke, A. G. Eguiluz.

Comp. Mater. Sci. 30, 104 (2004).

- 4. "Nonlinear, band-structure, and surface effects in the interaction of charged particles with solids".
 - J. M. Pitarke, I. G. Gurtubay, V. U. Nazarov.

Adv. Quantum Chem. 45, 247 (2004).

5. "Exchange and correlation effects in the relaxation of hot electrons in noble metals".

I. G. Gurtubay, J. M. Pitarke, and P. M. Echenique.

Phys. Rev. B 69, 245106 (2004).

- 6. "Large crystal local-field effects in the dynamical structure factor of rutile TiO₂".
 - I. G. Gurtubay, Wei Ku, J. M. Pitarke, A. G. Eguiluz, B. C. Larson, J. Tischler, and P. Zschack.

Phys. Rev. B 70, 201201 (2004).

- 7. "Electron-hole and plasmon excitations in 3d transition metals: Ab initio calculations and inelastic x-ray scattering measurements".
 - I. G. Gurtubay, J. M. Pitarke, Wei Ku, A. G. Eguiluz, B. C. Larson, J. Tischler, P. Zschack, and K. D. Finkelstein.

Phys. Rev. B 72, 125117 (2005).

8. "Quantum Monte Carlo calculations of the dissociation energies of three-electron hemibonded radical cation dimers".

- I. G. Gurtubay, N. D. Drummond, M. D. Towler, and R. J. Needs.
- J. Chem. Phys. 124, 024318 (2006).
- 9. "Dissociation energy of the water dimer from Quantum Monte Carlo calculations".
 - I. G. Gurtubay and R. J. Needs.
 - J. Chem. Phys. 127, 124306 (2007).
- 10. "Energy loss of charged particles moving parallel to a magnesium surface: *Ab initio* calculations".
 - M. G. Vergniory, V. M. Silkin, I. G. Gurtubay, and J. M. Pitarke. *Phys. Rev. B* **78**, 155428 (2008).
- 11. "Benchmark quantum Monte Carlo calculations of the ground-state kinetic, interaction and total energy of the three-dimensional electron gas."
 - I. G. Gurtubay, R. Gaudoin and J. M. Pitarke.
 - J. Phys.: Condens. Matter 22, 065501 (2010).
- 12. "Undamped low-energy plasmon in AlH3 at high pressure."
 - I. G. Gurtubay, B. Rousseau and A. Bergara.
 - Phys. Rev. B 82, 085113 (2010).
- 13. "Momentum-space finite-size corrections for Quantum-Monte-Carlo calculations."
 - R. Gaudoin, I. G. Gurtubay and J. M. Pitarke.
 - Phys. Rev. B 85, 125125 (2012).
- 14. "New parametrization of the exchange-correlation energy of a homogeneous electron gas with backflow corrections"
 - I. G. Gurtubay, R. Gaudoin and J. M. Pitarke.
 - En preparación.

8.2. Otras publicaciones

- 1. "Collaborative Inelastic X-ray Scattering and First Principles Theory Investigations of the Dynamical Electronic Structure of Transition Metals and Transition Metal Oxides".
 - B. C. Larson, J. Z. Tischler, P. Zschack, O. Restrepo, I. G. de Gurtubay, and A. G. Eguiluz.

Internal Report. Argonne National Laboratory (USA).

URL: http://www.aps.anl.gov/apsar2002/LARSONB2.PDF

9. Proyectos de Investigación financiados

1. Título: "Respuesta cuadrática y efectos de muchos cuerpos en sólidos reales".

Ref: BFM 2000-0359

Entidad Financiadora: Ministerio de Educación y Cultura.

Duración: 19 Diciembre 2000 - 19 Diciembre 2003.

Tipo participación: Investigadora en formación

Investigador principal: Prof. Dr. J. M. Pitarke de la Torre.

2. Título: "Excitaciones electrónicas, respuesta dinámica y efectos de muchos cuerpos en sólidos".

Ref: 1/MCYT 00063.310-15215/2003.

Entidad Financiadora: Ministerio de Educación y Cultura.

Duración: 1 Diciembre 2003 - 1 Diciembre 2006.

Tipo participación: Investigadora.

Investigador principal: Prof. Dr. J. M. Pitarke de la Torre.

3. Título: "Excitaciones electrónicas en nanoestructuras y superficies".

Subvención general a grupos de investigación consolidados y de alto rendimiento de la UPV/EHU.

Ref: 9/UPV 00206.215-13639/2001.

Entidad Financiadora: Gobierno Vasco y Universidad del País Vasco, UPV/EHU.

Duración: 1 Octubre 2001 - 31 Diciembre 2006.

Tipo participación: Investigadora.

Investigador principal: Prof. Dr. P. M. Echenique Landiribar.

4. Título: "Nanoquanta Network of Excellence of the 6th Framework Programme".

Ref: NMP4-CT-2004/500198

Entidad Financiadora: Comunidad Europea

Duración: 1 Junio 2004 - 31 Mayo 2008.

Tipo participación: Investigadora.

Investigador principal: Prof. Dr. P. M. Echenique Landiribar.

5. Título: "Excitaciones electrónicas, respuesta dinámica y efectos de muchos cuerpos en sólidos".

Ref: FIS2006-01343.

Entidad Financiadora: Ministerio de Educación y Ciencia.

Duración: 1 Diciembre 2006 - 1 Diciembre 2009.

Tipo participación: Investigadora.

Investigador principal: Prof. Dr. J. M. Pitarke de la Torre.

6. Título: "Estudio teórico de propiedades estructurales y electrónicas de nanoestructuras".

Subvención general a grupos de investigación consolidados y de alto rendimiento de la UPV/EHU.

Ref: GIC07/11.

Entidad Financiadora: Gobierno Vasco y Universidad del País Vasco.

Duración: 1 Enero 2007- 31 Diciembre 2012.

Tipo participación: Investigadora.

Investigador principal: Prof. Dr. Andrés Arnau Pino.

7. Título: "Excitaciones electrónicas, respuesta dinámica y efectos de muchos cuerpos en sólidos, superficies y nanoestructuras".

Ref: FIS2009-09631.

Entidad Financiadora: Ministerio de Ciencia e Innovación.

Duración: 1 Enero 2010 - 31 Diciembre 2012.

Tipo participación: Investigadora.

Investigador principal: Prof. Dr. J. M. Pitarke de la Torre.

10. Contribuciones a Congresos y Reuniones científicas

(Se ha subrayado el nombre del autor que presenta la comunicación)

10.1. Comunicaciones orales

- 1. "Dynamical Density Response of Metals with Narrow Bands: The cases of Cr, Ga and In".
 - I. G. Gurtubay, Wei Ku, J. M. Pitarke, A. G. Eguiluz.
 - March Meeting 2002. American Physical Society, Indianapolis, IN (USA), 18-22 March 2002.
- 2. "Inelastic X-ray scattering investigations of electron dynamics in copper".
 - C. A. Burns, M. Barbu, A. Said, J. Hill, J. Kim, I. G. Gurtubay, Wei Ku, J. M. Pitarke, A. G. Eguiluz.
 - March Meeting 2002. American Physical Society, Indianapolis, IN (USA), 18-22 March 2002.
- 3. "Effects of the crystal structure in the dynamical density-response of hcp transition metals".
 - I. G. Gurtubay, Wei Ku, J. M. Pitarke, A. G. Eguiluz.
 - XII Workshop of Computational Materials Science, Villasimius, Sardinia (Italy), 23-29 September 2002.
- 4. "Inelastic X-ray scattering and *ab initio* theory investigation of 3d transition metals".
 - B. C. Larson, J. Z. Tischler, P. Zschack, I. G. Gurtubay, Wei Ku, A. G. Eguiluz.
 - 3-7 March Meeting 2003. American Physical Society, Austin, TX (USA), March 2003.
- 5. "Inelastic X-ray scattering investigation of electron-hole excitations in Sc and Cr".
 - J. Z. Tischler, B. C. Larson, P. Zschack, A. G. Eguiluz, O. Restrepo, I. G. Gurtubay,
 - J. M. Pitarke, Wei Ku. March Meeting 2003. American Physical Society, Austin, TX (USA), 3-7 March 2003.
- 6. "The loss function of TiO₂ for large wave-vectors".
 - I. G. Gurtubay, J. M. Pitarke, A. G. Eguiluz, O. Restrepo, Wei Ku, B. C. Larson, J. Z. Tischler, P. Zschack.

March Meeting 2003. American Physical Society, Austin, TX (USA), 3-7 March 2003.

- 7. "Electron and hole dynamics at bulk and surfaces".
 - P. M. Echenique, A. Eiguren, V. M. Silkin, E. V. Chulkov, I. G. Gurtubay and J. M. Pitarke.
 - ESS'04 IUVSTA Workshop on Electron Scattering in Solids From Fundamental Concepts to Practical applications, Debrecen (Hungary). 4-8July 2004.
- 8. "Quantum Monte Carlo calculations of the dissociaton energy of three-electron hemibonded radical cation dimers".
 - I. G. Gurtubay and R. J.Needs. Ψ_k 2005 Conference: Toward atomistic materials design, Schwäbisch Gmünd (Germany). 17-21 September 2005.
- 9. "The model periodic Coulomb interaction in k-space: modelling the spherically averaged structure factor".
 - R. Gaudoin, I. G. Gurtubay and J. M Pitarke.

March Meeting 2008. American Physical Society, New Orleans (USA). 10-14 March 2008.

10.2. Comunicaciones tipo poster

- 1. "Dynamic structure factor of gold".
 - I. G. Gurtubay, J. M. Pitarke, I. Campillo, A. Rubio.
 - X Workshop of Computational Materials Science. Villasimius, Sardinia (Italy), 7-12 September 2000.
- 2. "Ab initio calculations of the dynamic response of gold".
 - I. G. Gurtubay, J. M. Pitarke, I. Campillo, A. Rubio.
 - International Conference "Electronic Structure: Predictions and Applications, Donostia (Spain), 4-6 October 2000.
- 3. "Ab initio calculations of the dynamic structure factor of gold".
 - I. G. Gurtubay, J. M. Pitarke, I. Campillo, A. Rubio.
 - March Meeting 2001. American Physical Society, Seattle, WA (USA), 12-16 March 2001.
- 4. "Stopping power of aluminum oxide".
 - I. G. Gurtubay, J. M. Pitarke, A. Rubio.

19th International Conference On Atomic Collisions in Solids, Paris (France), 29 July - 3 August 2001.

- 5. "Ab initio calculations of the dynamic response of alpha-Al₂O₃".
 - I. G. Gurtubay, J. M. Pitarke, A. Rubio.

Particle-Solid Interactions, Donostia. 11-16 September 2001.

- 6. "Ab initio calculations of electron-hole excitations in 3d transitions metals".
 - I. G. Gurtubay, A. G. Eguiluz, O. Restrepo, Wei Ku, J. M. Pitarke, B. C. Larson, J. Z. Tischler, P. Zschack.

Ninth Wien Workshop. L/APW+lo calculations with the WIEN2k code, Vienna (Austria), 23-26 April 2003.

- 7. "Energy-loss calculations and IXS measurements in 3d transition metals: The cases of Cr and Sc".
 - I. G. Gurtubay, A. G. Eguiluz, O. Restrepo, Wei Ku, J. M. Pitarke, B. C. Larson, J. Z. Tischler, P. Zschack.
 - 5th Donostia Encounter on Particle/Solid Interactions: Modifications following different interaction processes at surfaces, Donostia. (Spain), 8-13 September 2003.
- 8. "Electron-hole excitations in 3d transition metals: IXS and ab initio calculations".

 I. G. Gurtubay, A. G. Eguiluz, O. Restrepo, Wei Ku, J. M. Pitarke, B. C. Larson, J. Z. Tischler, P. Zschack.

Workshop on Ab Initio Electron Excitations Theory: Towards Systems of Biological Interests, Donostia (Spain), 21-24 September 2003.

- 9. "Exchange and correlation effects in the relaxation of hot electrons in noble metals". I. G. Gurtubay, J. M. Pitarke, P. M. Echenique.
 - III Reunión Nacional de Física del Estado Sólido, Donostia (Spain). 2-4 June 2004.
- 10. "Dissociation energy of the water dimer from Quantum Monte Carlo calculations".I. G. Gurtubay and R. J.Needs.

Advances in continuum quantum Monte Carlo methods, CECAM, Lyon, France. 27-31 August 2007.

- 11. "Quantum Monte Carlo study of the dissociation energy of the water dimer".
 - I. G. Gurtubay and R. J. Needs.

Advanced School on Quantum Monte Carlo Methods in Physics and Chemistry.

International Center for Theoretical Physics (ICTP), Trieste, Italy. 21 January - 2 February 2008.

- "Excitaciones electrónicas, respuesta dinámica y efectos de muchos cuerpos en sólidos". "Electronic excitations, dynamical response and many-body effects in solids".
 J. M. Pitarke, I. G. Gurtubay, R. Gaudoin, T. del Río, A. Bergara, M. Martínez-
 - Canales, and I. Errea.

 Zientzia eta Teknologia Fakultateko 1. Ikerkuntza Jardunaldiak, 1^{as} Jornadas de In-

Zientzia eta Teknologia Fakultateko 1. Ikerkuntza Jardunaldiak, 1^{as} Jornadas de Investigación de la Facultad de Ciencia y Tecnología. Leioa (Spain). 21-23 May 2008. ISBN:978-84-9860-118-3. Pages: 92 y 215.

- 13. "Band structure effects on the energy loss of charged particles moving parallel to a magnesium surface".
 - M. G. Vergniory, V. M. Silkin, I. G. Gurtubay and J. M. Pitarke. 25th Conference on Surface Science. Liverpool (UK). 27 July-1 August 2008.
- 14. "Benchmark DMC calculations of the kinetik, interaction and total energy of the homogeneous electron gas".
 - I. G. Gurtubay, R. Gaudoin, and J. M. Pitarke.
 - 14th International Workshop on Computational Physics and Materials Science: Total Energy and Force Methods. Miramare-Trieste (Italy). 8-10 January 2009.
- 15. "Pressure induced complexity in solids."
 - Aitor Bergara, Idoia G. Gurtubay, Asier Eiguren, Bruno Rousseau and <u>Ion Errea</u>. Zientzia eta Teknologia Fakultateko 2. Ikerkuntza Jardunaldiak, 2^{as} Jornadas de Investigación de la Facultad de Ciencia y Tecnología. Leioa (Spain). 15-17 May 2010.
- 16. "Electronic excitations and many-body effects in solids, surfaces and nanostructures".
 - Jose M. Pitarke, <u>Idoia G. Gurtubay</u>, Aitor Bergara, Asier Eiguren and Julen Ibañez. Zientzia eta Teknologia Fakultateko 2. Ikerkuntza Jardunaldiak, 2^{as} Jornadas de Investigación de la Facultad de Ciencia y Tecnología. Leioa (Spain). 15-17 May 2010.
- 17. "Dielectric response and optical properties of AlH₃ at high pressure".
 - I. G. Gurtubay, B. Rousseau and A. Bergara.

Passion for Knowledge Conference. Kursaal Centre of San Sebastian (Spain). 28 September - 1 October 2010.

18. "k-space based finite-size corrections for Quantum Monte Carlo calculations."
 <u>R. Gaudoin</u>, I. G. Gurtubay, and J. M. Pitarke.

 Passion for Knowledge Conference. Kursaal Centre of San Sebastian (Spain). 28
 September - 1 October 2010. Poster communication.

"Momentum-space finite-size corrections for Quantum Monte Carlo calculations."
 I. G. Gurtubay, R. Gaudoin and J. M. Pitarke
 Workshop on Computational Condensed Matter Physics, Materials Science and Na-

noscience from First Principles. Barcelona (Spain). 12-14 January 2012

11. Estancias en centros de investigación extranjeros

1. **Centros**: Dept. of Physics and Astronomy, Univ. of Tennessee, Knoxville y Solid State Division, Oak Ridge National Laboratory, (USA).

Contacto: Prof. Adolfo G. Eguiluz

Periodo: 11 Enero 2001 - 19 Marzo 2001

Tema: Cálculos de primeros principios de respuesta dinámica en metales

Clave: Becaria predoctoral

2. **Centro**: Hahn Meitner Institut, Berlin (Germany)

Contacto: Prof. Gregor Schiwietz

Periodo: 2 Noviembre 2001 - 12 Noviembre 2001

Tema: Cálculos de poder de frenado

Clave: Becaria predoctoral

3. **Centros**: Dept. of Physics and Astronomy, Univ. of Tennessee, Knoxville y Solid State Division, Oak Ridge National Laboratory, (USA).

Contacto: Prof. Adolfo G. Eguiluz

Periodo: 12 Noviembre 2001 - 18 Diciembre 2001

Tema: Cálculos de primeros principios de respuesta dinámica en cobre

Clave: Becaria predoctoral

4. **Centros**: Dept. of Physics and Astronomy, Univ. of Tennessee, Knoxville y Solid State Division, Oak Ridge National Laboratory, (USA).

Contacto: Prof. Adolfo G. Eguiluz

Periodo: 14 Marzo 2002 - 7 Abril 2002

Tema: Cálculos de primeros principios de respuesta dinámica en metales de transi-

ción

Clave: Becaria predoctoral

5. **Centros**: Dept. of Physics and Astronomy, Univ. of Tennessee, Knoxville y Solid State Division, Oak Ridge National Laboratory, (USA).

Contacto: Prof. Adolfo G. Eguiluz

Periodo: 20 Mayo 2002 - 28 Julio 2002

Tema: Cálculos de primeros principios de respuesta dinámica en metales de transi-

ción y colaboración con grupo experimental

Clave: Becaria predoctoral

6. **Centros**: Dept. of Physics and Astronomy, Univ. of Tennessee, Knoxville y Solid State Division, Oak Ridge National Laboratory, (USA).

Contacto: Prof. Adolfo G. Eguiluz

Periodo: 24 Febrero 2003 - 9 Marzo 2003

Tema: Cálculos de primeros principios de respuesta dinámica en metales de transi-

ción y colaboración con grupo experimental

Clave: Becaria predoctoral

7. Centro: Cavendish Laboratory, University of Cambridge, (UK).

Contacto: Prof. Richard Needs

Periodo: 1 Noviembre 2004 - 30 Septiembre 2006.

Tema: Cálculos de Monte Carlo cuántico

Clave: Investigadora postdoctoral

8. **Centro**: Department of Materials Physics. University of Leoben, Leoben, (Austria)

Contacto: Prof. Claudia Ambrosch-Draxl Periodo: 25 Febrero 2007 - 10 Marzo 2007

Tema: Respuesta dinámica y coeficiente de fricción en aislantes

Clave: Invitada

9. Centro: Cavendish Laboratory, University of Cambridge, UK.

Contacto: Prof. Richard Needs

Periodo: 14 Mayo 2007 - 15 Julio 2007.

Tema: Cálculos de Monte Carlo cuántico en agua

Clave: Invitada

12. Seminarios impartidos

1. 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.

- 2. *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.
- 3. *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.

13. Cursos recibidos

13.1. Cursos y seminarios de especialización

1. Título: PRACTICAL COMPUTING FOR SCIENTISTS. FROM DATA MINING TO HIGH PERFORMANCE ISSUES.

Duración: 16 Febrero 2001 - 13 Julio 2001.

Horas: 50

Centro: Donostia International Physics Center, Donostia-San Sebastian.

2. Título: ULTRAFAST SURFACE DYNAMICS.

Duración: 9 Julio 2001 - 13 Julio 2001.

Horas: 30

Centro: Universidad del País Vasco, UPV/EHU.

3. Título: INTRODUCCIÓN A LA TEORÍA CUÁNTICA DE MUCHOS CUERPOS I.

Duración: 8 Enero 2002 - 30 Enero 2002

Horas: 30

Centro : Facultad de Ciencia y Tecnología. Universidad del País Vasco, UPV/EHU, Leioa.

4. Título: INTRODUCCIÓN A LA TEORÍA CUÁNTICA DE MUCHOS CUERPOS II.

Duración: 29 Abril 2003 - 21 Mayo 2003.

Horas: 30

Centro: Facultad de Ciencia y Tecnología. Universidad del País Vasco, UPV/EHU, Leioa.

5. Título: AB-INITIO MANY BODY THEORY

Duración: 23 Julio 2007 - 27 Julio 2007

Horas: 50

Centro: Universidad del País Vasco, UPV/EHU.

6. Título: ADVANCED SCHOOL ON QUANTUM MONTE CARLO METHODS IN PHYSICS AND CHEMISTRY

Duración: 21 Enero 2008 - 2 Febrero 2008.

Horas: 60

Centro: International Center for Theoretical Physics (ICTP), Trieste (Italia).

7. Título: DN-NSM 2011. USPEX workshop

Duración: 23-30 june 2011

Centro: Université de Poitiers, Poitiers (France)

13.2. Otros cursos y seminarios

1. "El Legado del Siglo XX: Materia, Vida y Sociedad". Universidad Internacional Menéndez Pelayo. Santander, Agosto-Septiembre 2000.

2. "Atoms and Molecules at Surfaces"

XXI. Congreso Werner Brandt

Donostia-San Sebastian. Septiembre 2001.

- 3. "From Electrons to Materials Properties: Basic Theory and Computational Methods". American Physical Society and University of Illinois. Austin, TX (USA), Marzo 2003.
- 4. "12th International Workshop on Computational Physics and Materials Science: Total Energy and Force Methods".

The Abdus Salam International Centre for Theoretical Physics.

Trieste (Italia), Enero 2005.

5. "Albert Einstein Annus Mirabilis 2005".

Donostia International Physics Center.

Donostia-San Sebastian, Septiembre 2005.

14. Becas y ayudas recibidas

14.1. Becas de convocatoria oficial predoctoral

1. Beca de Colaboración

Finalidad: Introducción a la investigación. Medidas de difracción de rayos X.

Entidad Financiadora: Departamento de Educación, Universidades e Investigación.

Eusko Jaurlaritza - Gobierno Vasco.

Duración: Curso académico 1998-1999.

Centro: Facultad de Ciencia y Tecnología. Universidad del País Vasco, UPV/EHU,

Leioa.

2. Beca de Formación de Investigadores Predoctoral

Finalidad: Realización de la Tesis Doctoral.

Entidad Financiadora: Departamento de Educación, Universidades e Investigación.

Eusko Jaurlaritza - Gobierno Vasco.

Duración: 1 Octubre 1999 - 30 Septiembre 2003

Centro: Facultad de Ciencia y Tecnología. Universidad del País Vasco, UPV/EHU,

Leioa.

14.2. Becas de convocatoria oficial postdoctoral

1. Beca de Formación de Investigadores Postdoctoral

Finalidad: Cálculos de Monte Carlo cuántico en sistemas electrónicos.

Entidad Financiadora: Departamento de Educación, Universidades e Investigación.

Eusko Jaurlaritza - Gobierno Vasco.

Duración: 1 Octubre 2004 - 30 Septiembre 2006

Centro: Cavendish Laboratory. University of Cambridge, UK.

14.3. Otras becas y ayudas

1. Beca de Introducción a la Investigación

Finalidad: Introducción a la investigación.

Entidad Financiadora: Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC).

Duración: 1 enero 1999 - 31 diciembre 1999.

Centro: CSIC.

2. Beca Predoctoral

Finalidad: Estudio de efectos de muchos cuerpos en sólidos reales Entidad Financiadora: Donostia International Physics Center (DIPC).

Duración: 1 Octubre 2003 - 30 Octubre 2004

Centro: Facultad de Ciencia y Tecnología. Universidad del País Vasco, UPV/EHU,

Leioa.

3. Ayuda para estancia en el extranjero

Entidad Financiadora: Gobierno Vasco. Duración: 10 Enero 2001 - 20 Marzo 2001

Destino: Universidad de Tennessee, Knoxville (USA) y Oak Ridge National Labo-

ratory (USA)

4. Ayuda para estancia en el extranjero

Entidad Financiadora: Gobierno Vasco.

Duración: 4 Diciembre 2001 - 18 Diciembre 2001

Destino: Universidad de Tennessee, Knoxville (USA) y Oak Ridge National Labo-

ratory (USA) y Hahn Meitner Institut, Berlin (Alemania).

5. Ayuda para estancia en el extranjero

Entidad Financiadora: Gobierno Vasco.

Duración: 24 Febrero 2002 - 7 Marzo 2002

Destino: Universidad de Tennessee, Knoxville (USA) y Oak Ridge National Labo-

ratory (USA)

6. Ayuda para estancia en el extranjero

Entidad Financiadora: Gobierno Vasco. Duración: 19 Mayo 2002 - 28 Julio 2002

Destino: Universidad de Tennessee, Knoxville y Oak Ridge National Laboratory

(USA)

15. Premios recibidos

1. Premio Extraordinario de Licenciatura

Facultad de Ciencias, Universidad del País Vasco/Euskal Herriko Unibertsitatea, UPV/EHU. Año 1999.

2. Premio Extraordinario de Doctorado

Universidad del País Vasco/Euskal Herriko Unibertsitatea, UPV/EHU. Curso 2004-2005.

16. Otros méritos

16.1. Docentes

 Un periodo de actividad docente (quinquenio de docencia) reconocido por la UPV/EHU según el decreto 41/2008, de 4 de marzo. Tramo reconocido: 22 de Febrero de 2002 a 09 de Mayo de 2010.

- Acreditación Lingüística en Inglés para la impartición de docencia en la UPV/EHU
 expedida por el Vicerrectorado de Relaciones Internacionales en el marco del Plan
 de Plurilingüismo de la Universidad del País Vasco/Euskal Herriko Unibertsitatea,
 UPV/EHU. 2006.
- Acreditación Lingüística en Francés para la impartición de docencia en la UPV/EHU
 expedida por el Vicerrectorado de Relaciones Internacionales en el marco del Plan
 de Plurilingüismo de la Universidad del País Vasco/Euskal Herriko Unibertsitatea,
 UPV/EHU. 2008.
- 4. Calidad de la actividad docente. En relación con la encuesta de opinión del alumnado sobre la docencia de su profesorado. Media de 4.2 sobre 5. Servicio de Evaluación Docente. UPV/EHU.
- 5. Tutora de Prácticas en Empresas. Programas de Cooperación Educativa en la empresa CIC nanoGUNE Consolider, San Sebastian. Curso 2008/2009 (3 alumnos), 2009/2010 (4 alumnos) y 2010/2011 (3 alumnos).
- 6. Tutora de alumnos de nuevo ingreso en la titulación de Física, 2008/2009, 2009/2010, 2010/2011.
- 7. Traducción al euskera de los protocolos de prácticas de la asignatura Métodos Experimentales I (4° curso Licenciatura en Física). Año 2006.

16.2. Investigación

- 1. Evaluación de la actividad investigadora: Evaluación positiva de dos sexenios de investigación en la convocatoria de la CNEAI y UNIBASQ de diciembre de 2011.
- 2. Asociada del Donostia International Physics Center (DIPC).

3. Reconocimiento de créditos docentes por actividades investigadoras realizadas durante los cursos 2005/2006, 2006/2007, 2007/2008, 2008/2009, 2009/2010 y 2010/2011.

16.3. Gestión

- 1. Coordinadora del 1^{er} curso de Grado de Física. 21 Abril 2010 Actualidad.
- Miembro de la Comisión de Estudios del Grado en Física.
 Abril 2010 Actualidad.
- Miembro de la Junta de la Facultad de Ciencia y Tecnología.
 de Diciembre de 2010 31 Mayo 2011.
- 4. Miembro de la Comisión Permanente de la Facultad de Ciencia y Tecnología. 9 Febrero – 31 Mayo 2011.
- 5. Miembro de la Comisión Académica del Master Universitario "Física y Tecnología de Materiales" de la Universidad del País Vasco/Euskal Herriko Unibertsitatea, UPV/EHU. 2009-2010.
- 6. Miembro de la Comisión para el elaboración del plan docente del Master Universitario "Física y Tecnología de Materiales" de la Universidad del País Vasco/Euskal Herriko Unibertsitatea, UPV/EHU. 2009-2010.
- 7. Miembro del Consejo de Departamento de Física de la Materia Condensada de la Facultad de Ciencia y Tecnología de la Universidad del País Vasco, UPV/EHU. Vocal Representante de Tercer Ciclo. Diciembre 2000 Febrero 2002.
- 8. Colaboradora en el Proceso de Evaluación de la Memoria EFQM realizada por Euskalit para la Facultad de Ciencia y Tecnología. Octubre-Noviembre 2006. (Q de plata 2006).
- Colaboradora en la elaboración del plan estratégico 2011-2015 de la Facultad de Ciencia y Tecnología.
- 10. "Curso de gestión de contenidos web" para la administración de páginas web institucionales de la UPV/EHU.
 - Universidad del País Vasco/Euskal Herriko Unibertsitatea, UPV/EHU. Junio 2009.

Curriculum Vitae 32

11. Responsable de la página web del grupo de investigación "Electronic properties and excitations at solids, surfaces and nanostructures" del Departamento de Física de la Materia Condensada de la UPV/EHU.

16.4. Proyección a la sociedad

- 1. Organización y participación en las Jornadas de Puertas Abiertas de la Facultad de Ciencia y Tecnología. Años: 2003, 2004, 2009, 2010, 2011 y 2012.
- 2. 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, con cinco artículos:
 - a) Ley de conservación de la energía
 - b) inercia
 - c) carga
 - d) masa
 - e) protón
- 3. Participación en el Programa Campus Científico de Verano 2011 organizado por el Ministerio de Educación y la Fundación Española para la Ciencia y la Tecnología, desarrollado en la UPV/EHU en el marco del Proyecto Euskampus. Julio 2011.
- 4. Monitora de demostraciones de Física de la UPV/EHU en la VIII, IX y X Semana de la Ciencia, la Tecnología y la Innovación. Bilbao, 10-16 noviembre 2008, 11-15 noviembre 2009, 11-14 noviembre 2010, 9-13 noviembre 2011.
- 5. 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.
- Coordinadora del programa "Física en Acción Fisikaz Blai". Ediciones de 2010, 2011 y 2012.
- Participación en el programa "Física en Acción Fisikaz Blai". Ediciones de 2009, 2010, 2011 y 2012.
- Colaboración en el desarrollo de las actividades científicas organizadas en la jornada UNITXIKI-2009, dentro del Proyecto Educativo "The Meninas Project I & II". Facultad de Ciencia y Tecnología, UPV/EHU, 8 de junio de 2009.

Curriculum Vitae 33

16.5. Idiomas

	Lee	Escribe	Habla
Inglés	C	C	С
Francés	C	C	C
Euskera	C	C	C
Alemán	R	R	R

(C = Correctamente; R = Regular)

Acreditaciones de idiomas:

INGLÉS:

- Certificado-Diploma de Aptitud Ciclo Superior de Inglés. Escuela Oficial de Idiomas. 2004.
- First Certificate in English. University of Cambridge. 1993.

FRANCÉS:

- Certificado-Diploma de Aptitud Ciclo Superior de Francés. Escuela Oficial de Idiomas. 2008.
- Diplôme d'Etudes en Langue Française. DELF. 1er degré. 1993
- Diplôme d'Etudes en Langue Française. DELF. 2eme degré. 1993

EUSKERA

- Certificado-Diploma de Aptitud de Euskera. Escuela Oficial de Idiomas. 1993.
- EGA. Euskararen Gaitasun Agiria. Gobierno Vasco. 1993
- Certificado de Acreditación para la docencia Universitaria en Lengua Vasca por la Universidad del País Vasco/Euskal Herriko Unibertsitatea, UPV/EHU. 2001. Area: Física.

Parte II Proyecto Docente

1 Introducción

El Proyecto Docente que se presenta y defiende a continuación constituye parte de la documentación requerida para el concurso de acceso a la plaza vacante de los Cuerpos Docentes Universitarios con número de referencia TUC8/1-D00063-13 correspondiente al Cuerpo de Profesores Titulares de Universidad en el área de conocimiento de Física de la Materia Condensada, convocada por la Universidad del País Vasco-Euskal Herriko Unibertsitatea de acuerdo con la resolución del 7 de marzo de 2012 y publicada en el BOE del 13 de abril de 2012. La plaza está adscrita al Departamento de Física de la Materia Condensada de la Facultad de Ciencia y Tecnología, siendo su perfil lingüístico bilingüe (castellano-euskera), su régimen de dedicación a tiempo completo y las actividades docentes e investigadoras a realizar "Física General".

1.1. Marco legal

La Universidad española se encuentra, hoy en día, legalmente sujeta a la Ley Orgánica 4/2007, de 12 de abril publicada en el BOE número 89 del 13 de abril y que modifica la anterior Ley Orgánica 6/2001 (LOU), publicada el 24 de diciembre de 2001. Esta última entró en vigor a partir del 13 de enero de 2002 y derogó la anterior Ley de Reforma Universitaria (Ley Orgánica 11/1983) de 25 de agosto publicada en el BOE de 1 de Septiembre de 1983 (LRU).

Las modificaciones más importantes introducidas por la LOU respecto a la LRU se centraron en tres aspectos principales: a) creación de la Agencia Nacional de Evaluación de la Calidad y Acreditación (ANECA), b) la implantación del Sistema de Habilitación y c) la revisión de los órganos de gobierno.

Asimismo, los acuerdos en política de educación superior en Europa y el impulso que la Unión Europea pretende dar a la investigación, ha hecho que la LOU haya tenido que ser modificada incorporando algunos elementos que apuntan hacia la mejora de la calidad de las universidades españolas, la sustitución de las pruebas de hablitación por un sistema de acreditación y la elaboración del estatuto del estudiante universitario, entre otros.

En definitiva, la nueva reforma pretende dar el paso necesario para la organización

del sistema universitario español hacia una estructura más abierta y flexible, que sitúe a las universidades españolas en una mejor posición para la cooperación interna y la competencia internacional, a través de la creación, transmisión, desarrollo del conocimiento científico y tecnológico y de la transferencia de sus beneficios a la sociedad.

La Resolución de 15 de septiembre de 2009, del Vicerrector de la Universidad del País Vasco/Euskal Herriko Unibertsitatea, UPV/EHU y publicada en el BOPV el 9 de octubre de 2009 regula los concursos de acceso a cuerpos de funcionarias y funcionarios docentes en el ámbito de la Universidad del País Vasco/Euskal Herriko Unibertsitatea, UPV/EHU.

1.2. Condicionantes del Proyecto

La elaboración del proyecto docente de una asignatura está sometida a una serie de condicionantes, que en mayor o menor medida, establecen y delimitan su contenido y en gran parte su desarrollo. Muchos de estos condicionantes son ajenos a la persona que realiza la programación, aunque también existen condicionantes subjetivos impuestos por la persona que elabora el proyecto.

La estructuración de cualquier programa teórico y práctico de una asignatura depende no sólo de la disciplina científica en la que se encuadra, sino también de la configuración del plan de estudios en el que ésta se inscribe, e, incluso, de su pertenencia a un determinado curso del plan. El proyecto docente aquí presentado intenta ajustarse, en la medida de lo posible, a una situación real que se enmarca en el plan de estudios de la Universidad del País Vasco, donde la concursante viene desarrollando su labor docente e investigadora.

En estos momentos, el sistema universitario se encuentra en una situación de cambio marcado por dos factores, la reforma de la LOU y la necesidad de integrarse en el Espacio Europeo de Educación Superior. *Este cambio no es sólo estructural sino que además impulsa un cambio en las metodologías docentes, que centra el objetivo en el proceso de aprendizaje del estudiante, en un contexto que se extiende ahora a lo largo de la vida* (BOE N°260, 30 octubre de 2007). De hecho, la adaptación de las universidades al EEES ha sido el detonante de la modificación de la LOU por la Ley Orgánica 4/2007. El primer paso de esta reforma quedó establecido mediante la creación de un registro de las nuevas titulaciones adaptadas al Espacio Europeo y la presentación de las directrices a respetar por cada universidad a la hora de desarrollar sus planes de estudios. Este nuevo plan de estudios ("Plan Bolonia") se ha implantado en el pasado curso 2010/2011.

Dada la reciente entrada en vigor del nuevo plan en el momento de redactar esta memoria, la concursante se ha planteado la necesidad de hacer referencia a sus principales directrices. Esta es la finalidad del apartado 2. En este apartado tras una breve introducción para situar la asignatura *Física General* en el contexto de dicho plan, se describen las competencias, la metodología y la evaluación. A continuación se muestra un esquema del programa teórico de los contenidos de la asignatura, que se describen detalladamente en la sección siguiente. Por último, como complemento, se expone el programa de prácticas, que constituye parte de otra asignatura (*Técnicas Experimentales I*) que no es objeto de este proyecto docente.

Sin embargo considero importante exponerla junto con el programa de la asignatura teórica por varias razones: Por una parte, en los planes anteriores las prácticas de labo-

ratorio formaban parte de la asignatura "Física General". Por otra, su contenido está estrechamente relacionado con lo que se estudia en la asignatura teórica y constituye un complemento necesario y fundamental a la teoría y a los problemas para que los alumnos tengan la oportunidad de aplicar en el laboratorio lo que han aprendido en las clases magistrales. Por último en la planificación actual, y con el nombre de Técnicas Experimentales I, es una asignatura de segundo cuatrimestre que me ha sido asignada en el reparto de carga docente del departamento. Esto supone para los alumnos una gran ventaja, desde el punto de vista práctico y formativo, ya que les permite afianzar sus conocimientos sobre la asignatura.

Asimismo se estima conveniente dedicar el apartado 3 a describir las modificaciones que el nuevo plan de estudios adaptado al EEES ha introducido en la asignatura *Física General* con respecto al plan 2000/2001, en lo que se refiere a competencias, metodología, evaluación, y programa de la asignatura.

Finalmente, concluyo con una reflexión crítica basada en mi experiencia personal de la docencia de esta asignatura durante el primer año de su implantación.

2 El plan docente en el EEES: Bolonia

2.1. Introducción

La Declaración de la Sorbona, firmada por varios países europeos en 1998, establece las primeras actuaciones encaminadas a la convergencia europea en materia universitaria. Los principios generales de esta declaración fueron respaldados y apoyados por 29 estados europeos con la firma de la Declaración de Bolonia en 1999, declaración que de hecho da nombre al proyecto de construcción del Espacio Europeo de Educación Superior (EEES): "Proceso de Bolonia" o "Plan Bolonia".

La definición del EEES implica una profunda reestructuración de la docencia universitaria en lo concerniente al diseño curricular, a las metodologías de enseñanza y a los modelos de evaluación. Los objetivos básicos del Espacio Europeo de Educación Superior son los siguientes:

- La adopción de un sistema de titulaciones flexible, fácilmente comprensible y comparable, que facilite la comprensión entre los diferentes sistemas educativos. Con este objetivo se ha implantado el denominado "Suplemento al Diploma" (Diploma Supplement), aportando una información detallada sobre los estudios cursados por el alumno y describiendo las capacitaciones y habilidades adquiridas.
- Un sistema basado en dos ciclos formativos principales: grado y postgrado.
- El establecimiento de un sistema de créditos común, el ECTS (European Credit Transfer System – Sistema Europeo de Transferencia de Créditos), para promover una mayor movilidad de los estudiantes.
- La promoción de la movilidad: libre circulación de estudiantes, profesores y personal administrativo de las universidades y otras instituciones de Educación Superior europea.
- El impulso de la cooperación europea para asegurar un nivel de calidad mediante el desarrollo de criterios y metodologías comparables.

Promoción del aprendizaje y evaluación continuados.

En el sistema ECTS un crédito representa unas 25 horas de trabajo por parte del alumno, estableciendo la cantidad de 60 créditos para un año académico y por tanto de 240 créditos para el grado (4 años).

2.2. La nueva estructura de los estudios universitarios

El objetivo fundamental es adaptar los estudios universitarios al contexto europeo de tal manera que se armoniza la duración de los estudios, los métodos de aprendizaje y la evaluación de las actividades académicas con la voluntad de promover la movilidad de los estudiantes y de los titulados y tituladas, posibilitando un sistema de reconocimiento y transferencia de créditos.

El Real decreto 1393/2007, de 29 de octubre, desarrolla la estructura de las enseñanzas universitarias oficiales, de acuerdo con las premisas del EEES, y establece tres tipos de estudios conducentes a la obtención de los correspondientes títulos universitarios oficiales: grado, máster y doctorado.

Así las enseñanzas universitarias conducentes a la obtención de títulos de carácter oficial y con validez en todo el territorio nacional se estructuran en 2 niveles y tres ciclos:

Estudios de Grado

El primer ciclo conduce a títulos oficiales de Grado, que tienen por finalidad la obtención de una formación de carácter general, principalmente orientada a la preparación del alumno para el ejercicio de actividades de carácter profesional, y que suprime la antigua división existente entre diplomaturas y licenciaturas con la intención de facilitar un acceso más ágil y adecuado al mercado laboral y a la propia sociedad al proporcionar la mayor parte de las competencias profesionales necesarias. Los planes de estudios de las titulaciones de Grado tendrán 240 créditos ECTS, repartidos en 4 cursos de 60 ECTS cada uno, que contendrán toda la formación teórica y práctica que el estudiante debe adquirir: aspectos básicos de la rama de conocimiento, materias obligatorias u optativas, seminarios, prácticas externas, trabajos dirigidos, trabajo de fin de Grado u otras actividades formativas.

Estudios de máster

El Postgrado comprende el segundo y tercer ciclo, que conducen respectivamente

a los títulos oficiales de Máster (en clave de especialización) y títulos Oficiales de Doctor (en clave de investigación). La superación de cada ciclo dará lugar a la obtención del correspondiente título.

Los estudios de máster tienen la finalidad de ofrecer una formación más avanzada, orientada a la especialización académica y/o investigadora. Los planes de estudios tendrán una duración de entre 60 y 120 créditos.

Estudios de doctorado

Los estudios de doctorado constan de un periodo de formación y de un periodo de investigación que integran lo que se denomina "programa de doctorado". Para acceder al periodo de formación es necesario cumplir los mismos requisitos de acceso que para los estudios de máster. Para acceder al periodo de investigación es necesario estar en posesión de un título oficial de máster u otro título expedido por una institución de educación superior del EEES.

En el sistema ECTS, se entiende por carga total de trabajo del estudiante el número total de horas de trabajo que dedica a las tareas que se le encomiendan para el logro de los objetivos de un programa. En las horas totales de trabajo que mide un crédito ECTS se incluyen, por tanto, no sólo las horas de aula, teóricas y prácticas, sino también las horas de estudio, las horas dedicadas a la realización de seminarios, de trabajos individuales o en grupo, de prácticas o proyectos, a la resolución de ejercicios, a la consulta de bibliografía, las exigidas para preparar y realizar las pruebas de evaluación, etc. La gran diferencia con el antiguo sistema de cómputo es que todas las actividades no presenciales que se realizaban para superar una asignatura, no se tenían en cuenta a la hora de contabilizar créditos. En el sistema anterior, el crédito representaba el número de horas de clase que un profesor impartía. En concreto, un crédito correspondía a 10 horas lectivas (o 10 horas "de clase"). El crédito europeo, sin embargo, mide el volumen o carga total del trabajo de aprendizaje del estudiante para alcanzar los objetivos previstos en el plan de estudios, y equivale a una carga de trabajo del estudiante de 25 horas.

La nueva organización de las enseñanzas universitarias responde no sólo a un cambio estructural sino que además impulsa un cambio en las metodologías docentes que centra el objetivo en el proceso de aprendizaje del estudiante, y todo ello en un contexto que se extiende ahora a lo largo de la vida. Por lo tanto, no basta con reformar los planes de estudio anteriores redimensionándolos en base a los créditos ECTS. Los objetivos docentes y el modelo de aprendizaje exigen hacer una transformación profunda de los planes de estudio que hemos conocido hasta ahora cuestionando las bases de su sistema y proponiendo

un sistema alternativo radicalmente distinto. La tendencia actual asociada al EEES, es que vamos hacia una sociedad del aprendizaje. Esto supone el desplazamiento de una educación centrada en la enseñanza hacia una educación centrada en el aprendizaje.

En resumen, el ECTS es un sistema centrado en el estudiante y basado en la carga de trabajo que debe realizar para el logro de los objetivos que deben ser especificados, preferiblemente, en términos de resultados de aprendizaje (competencias) que el estudiante deberá adquirir.

2.2.1. "Física General" en la Facultad de Ciencia y Tecnología de la UPV/EHU.

La Física juega un papel importante en la sociedad, contribuyendo a la generación del conocimiento y el desarrollo tecnológico. Una economía competitiva cobra fuerza mediante la innovación generada a través del conocimiento, gracias a la conjuncion de la investigación básica y de una labor más aplicada ligada al desarrollo tecnológico.

Probablemente lo más novedoso del plan de estudios de la facultad es que las asignaturas del primer año son comunes para los distinto Grados ofertados en la rama de Ciencias. De hecho, la asignatura objeto de este proyecto docente es común al Grado en Física, Grado en Ingeniería Electrónica y Grado en Matemáticas. Principalmente va dirigida a los Grados que en cursos superiores tienen asignaturas estrechamente relacionadas con la Física. Es una adaptación de *Fundamentos de Física* del plan anterior.

Se trata de una asignatura anual de 12 créditos ECTS, lo que supone un curso anual con un promedio de 4 horas semanales de clase presencial para el alumno.

Los **grados** están estructurados en **módulos** en los que se trabajan grupos más específicos de **competencias**¹, o forma de expresión de los objetivos, y se desarrollan **destrezas** concretas. En el caso del Grado en Matemáticas la asignatura forma parte del módulo "Física", en el Grado en Física la asignatura forma parte del módulo "Conceptos Básicos" y en el caso del Grado en Ingeniería Electrónica forma parte del módulo "Fundamentos científicos para la ingeniería".

Las competencias de estos módulos (CM) son:

CM01: Adquirir los conocimientos necesarios para comprender con claridad los principios básicos de la Física Clásica, la Química y la Electrónica básicas y sus aplicaciones

¹ Me referiré a las competencias con detalle en el apartado 2.3.

CM02: Plantear correctamente y resolver problemas que involucren los principales conceptos de la Física Clásica, la Química y la Electrónica y sus aplicaciones

- CM03: Documentarse y plantear de manera organizada temas relacionados con las materias del módulo para afianzar o ampliar conocimientos y para discernir entre lo importante y lo accesorio
- CM04: Exponer por escrito y oralmente problemas y cuestiones sobre Física Clásica, Química y Electrónica, para desarrollar destrezas en la comunicación científica

2.3. Competencias

En el contexto del EEES, los objetivos se expresan como competencias que se definen en términos de capacidades. Una competencia es la capacidad de desarrollar con éxito una tarea en un determinado contexto.

Las competencias se entienden como conocer y comprender (conocimientos teóricos), saber cómo actuar (aplicaciones prácticas de éstos) y saber cómo ser (valores como partes integrantes del contexto social).

A la hora de establecer competencias, deberemos hacerlo a tres niveles:

- Competencias de contenidos: Para todos los conceptos susceptibles de ser aprendidos.
- 2. Aptitudes procedimentales: Para capacidades que condicionan el potencial de aprendizaje.
- 3. Competencias actitudinales: Para las que regulan la predisposición para aprender.

Las competencias por ser manifestaciones de la capacidad para realizar tareas pueden ser verificadas y evaluadas, y además en función del dominio relativo, podrán tener distintos niveles de adquisición.

Los cambios fundamentales realizados sobre el binomio enseñanza-aprendizaje, centran su esfuerzo en el individuo que aprende para hacerle capaz de manejar el conocimiento, actualizarlo y seleccionarlo para lo que deberá estar en permanente contacto con las fuentes de información, y además comprender lo aprendido para que pueda ser adaptado a situaciones nuevas y rápidamente cambiantes.

El cambio y la variedad de contextos requieren la exploración constante de las demandas sociales, que permitirán diseñar los perfiles profesionales y académicos. Por otra parte, el lenguaje de las competencias es el más apropiado para la consulta y el diálogo con los representantes de la sociedad no directamente involucrados en la vida académica.

Asimismo, la formación para el empleo debe ir en paralelo a la concepción de una educación para la ciudadanía responsable que incluye además de la necesidad de desarrollarse como persona, ser capaz de afrontar responsabilidades sociales.

Los conocimientos (adquiridos en una formación basada en la enseñanza) pueden "caducar", pero la capacitación para la resolución de problemas (adquirida en una formación basada en el aprendizaje) no caduca. En una sociedad que cambia con rapidez,

los procesos instructivos deben promover personas capaces, es decir personas con cierta autonomía para abordar situaciones novedosas y responder adecuadamente a las mismas.

Para organizar las competencias se utilizan distintos criterios según su ámbito sea de mayor a menor extensión.

- Competencia de **Titulación**
- Competencia de **Módulo**
- Competencia de Asignatura

Dentro de cada uno de estos ámbitos habrá dos tipos de competencias:

- Competencias transversales ó genéricas
- Competencias no transversales ó específicas o técnicas

Sobre todos estos tipos de competencias existen datos contrastados y ejemplos concretos en el Libro Blanco del Título de Grado en Física y en el Proyecto Tuning. De todos estos documentos se puede inferir que no todas las competencias tienen la misma importancia y que ésta viene determinada por los diferentes perfiles profesionales.

El proponer pocas competencias obliga a un tipo de redacción muy general y a veces poco significativa; el proponer muchas complica la gestión de la propuesta curricular por la necesidad de buscar tareas para desarrollarlas y luego evaluarlas. Hay que tener muy claro antes de abordar el curriculum de la materia cuál será el número de competencias y el tipo de redacción mediante una clarificación terminológica y una corrección formal de las mismas.

Una competencia desde el punto de vista de su estructura está formada por:

- a) Una operación materializada en un verbo de acción, utilizando los muy generales como comprender, aprender y saber para competencias generales, mientras que aquellos que definan aprendizajes fácilmente reconocibles y evaluables por tareas específicas como analizar, valorar, definir, resolver, etc se utilizarán para competencias específicas.
- **b)** Una regulación (no siempre), materializada por un adverbio que matiza la acción: *críticamente, minuciosamente, con precisión*, etc.
- c) El objeto sobre el que recae la acción

d) Un fin determinado, siempre que sea posible, que indica el "para qué" de la acción.

Las competencias de la Titulación pueden tener como referencia más de un contexto de aplicación simultánea en función del ámbito de desarrollo del estudiante:

- Académico: el contexto de uso hace referencia a la propia universidad.
- Preprofesional: el contexto de uso hace referencia al futuro marco profesional previsible.
- Social: el contexto de uso hace referencia al entorno social.

Por el lugar en el que se enmarca la asignatura en el Grado, esta debe ser una introducción al estudio de la Física que proporcione una visión global de lo que el alumno estudiará en los cursos siguientes. Además, algunos de los contenidos que se proponen en el programa ya han sido estudiados en cursos anteriores y todos ellos se desarrollarán en profundidad en los cursos superiores del Grado.

La asignatura *Física General* pretende ofrecer al alumno una presentación lógica y unificada de la Física a nivel introductorio, haciendo énfasis en las ideas básicas que constituyen el fundamento de la Física, introducir al estudiante en el método científico para que aprenda a razonar de acuerdo con él y consiga diferenciar claramente lo que es un principio de lo que es una ley o una teoría, formular las leyes básicas conociendo las hipótesis de partida, expresarlas con el léxico adecuado, extraer las consecuencias más inmediatas de dichas leyes y analizar si están de acuerdo con la experiencia, o idear mecanismos sencillos de comprobación.

A lo largo del curso se debe poner especial énfasis en señalar que la Física es fundamentalmente una Ciencia Experimental. Su objetivo es la descripción de los fenómenos naturales y sólamente de ellos se puede extraer la información necesaria, es decir, que la observación y la experimentación son las bases de nuestro conocimiento físico. Por la misma razón se intentará despertar o mantener en los alumnos una actitud de curiosidad científica que les impulse a profundizar en el conocimiento de la Naturaleza y a desarrollar su capacidad crítica.

Otro aspecto importante es fomentar la utilización de libros, revistas científicas y de otras fuentes de información, como la documentación *on-line* a través de internet. Generalmente, los alumnos tienden a conformarse con las explicaciones dadas en clase por el profesor, sin embargo es muy importante que el estudiante indague y busque información en la bibliografía propuesta y en internet, no sólo para que conozca diferentes puntos de

vista sobre los temas de estudio y de ese modo aumente su conocimiento, sino también para que adquiera el hábito de la consulta y de la documentación.

Como competencias específicas de la asignatura (CA) de *Física General* se enumeran los siguientes:

- 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.

2.4. Metodología

La labor docente no debe consistir únicamente en la transmisión de conocimientos propios de la asignatura, sino también en el desarrollo de la capacidad crítica y adquisición de una metodología científica por parte del alumno. Estas cualidades fundamentales en todo científico deben ser fomentadas por el profesor mediante el uso de una metodología adecuada. El mayor o menor éxito obtenido por diferentes métodos didácticos depende, evidentemente, del profesorado, pero también de los medios y condiciones de los que se dispone, el número de alumnos por clase, la preparación previa de los alumnos y los preconceptos que éstos poseen sobre la asignatura. A la hora de presentar la metodología en una asignatura universitaria es necesario tener en cuenta esos factores para elaborar un método docente práctico y aplicable.

Es precisamente aquí donde la innovación que supone la aplicación de la "filosofía" propuesta en el "Plan Bolonia" va a tener un mayor reflejo, por ello, antes de proceder a definir el contenido de la asignatura *Física General*, es decir, antes de concretar *qué se va a enseñar* es conveniente realizar una reflexión sobre algunos aspectos importantes como *a quién* se va a enseñar, *quién va a transmitir* los conocimientos, *cómo se van a transmitir* éstos, y *cómo se va a evaluar* el rendimiento y la capacitación de los estudiantes. Éste es el objetivo de esta sección y la siguiente.

2.4.1. Sobre el alumnado

El alumnado es un aspecto muy importante a la hora de diseñar el proyecto docente. Es de poca utilidad diseñar un proyecto docente extraordinariamente ambicioso si eso supone que sólo un porcentaje mínimo de alumnos puede superar la asignatura. Por ello, conviene tener en cuenta el tipo de alumnado que se va a tener enfrente a la hora de "salir a la pizarra".

En el caso que nos ocupa, es una asignatura que se imparte en el primer curso del Grado en Física, en el Grado en Ingeniería Electrónica y en el Grado en Matemáticas. El alumnado procede de distintos centros de Enseñanza Secundaria con diferentes grados de exigencia y aunque se supone que todos los alumnos y alumnas deberían haber cursado las asignaturas de Física y de Matemáticas, bien del itinerario Ciencias de la Naturaleza y de la Salud, o del itinerario Tecnológico eso no sucede siempre. Según mi propia experiencia en algunos casos no han cursado la asignatura de Física en bachiller, especialmente los que eligen el Grado en Matemáticas. Esto se refleja también en la distinta motivación

que presentan frente a la asignatura de *Física General* los estudiantes matriculados en los distintos grados; así varía mucho entre estudiantes del Grado en Matemáticas y del Grado en Física, mientras que tanto la exigencia de horarios como de contenidos son los mismos en ambos grados. Esto es un factor más a tener en cuenta por parte del profesor a la hora de impartir esta asignatura con alumnos de los distintos grados.

Según el EEES la incorporación del crédito ECTS debe conllevar un cambio en la actitud del estudiante, que deja de ser mero receptor de conocimientos (docencia basada en la enseñanza), para pasar a asumir una actitud activa y autónoma con relación a las actividades planificadas que ha de realizar (docencia basada en el aprendizaje). El nuevo sistema exige al alumno más protagonismo y cuotas más altas de compromiso.

Por ello, es necesario reducir la utilización de tareas presenciales y potenciar las tareas semipresenciales y a distancia con el objeto de enseñar a aprender para que el estudiante pueda "aprender a aprender" concibiendo la educación universitaria como una etapa más del aprendizaje a lo largo de la vida. Esto nos conduce al concepto de formación continua mediante la cuál los individuos son capaces no sólo de manejar el conocimiento, actualizarlo, seleccionar lo que es adecuado para un contexto determinado, sino también comprender lo aprendido para adaptarlo a nuevas situaciones.

2.4.2. Sobre el profesor

La labor docente comprende básicamente las siguientes actividades: clases teóricas, prácticas de aula, tutorías, seminarios, la comunicación *on-line* y prácticas de laboratorio. Si todas estas actividades no son impartidas por el mismo profesor es importante que exista una estrecha coordinación entre los profesores, tanto al comienzo del curso para la planificación de la asignatura, como a lo largo del mismo para intercambiar opiniones sobre la manera en que se desarrolla. Asimismo, dada la afinidad entre ciertas materias del programa y otras asignaturas que se imparten en cursos posteriores, es conveniente delimitar los contenidos de los temas de modo que no se produzcan solapamientos o lagunas sino que, por el contrario, el distinto modo de enfocarlos resulte enriquecedor para el alumno.

Al comenzar el curso es importante que el profesor presente una visión general de la asignatura, los objetivos propuestos y sus campos de aplicación. Para ello es necesario exponer el programa y comentarlo extensamente. Asimismo, es preciso proporcionar una bibliografía apropiada que sirva de referencia y de apoyo al alumno. Esta bibliografía debe ser fácilmente accesible y adecuada al nivel del curso, debe contener un número razonable

de textos teóricos y de problemas y, a ser posible, presentar una notación homogénea. Afortunadamente, existe una amplia y variada bibliografía sobre Física básica para los primeros cursos, y los estudiantes disponen de suficientes ejemplares en las bibliotecas de la universidad. Es importante insistir con frecuencia sobre la importancia de consultar los libros de texto para obtener diferentes puntos de vista de un mismo problema.

Uno de los mayores cambios introducidos por el sistema ECTS es la forma de desarrollar la labor docente del profesor. Su labor fundamental es la de enseñar a aprender. No se limita sólo a transmitir conocimientos, sino que ha de organizar tareas, seminarios, evaluaciones continuas y exámenes, para fomentar en el estudiante la adquisición de conocimientos, capacidades y destrezas que le permitan responder adecuadamente a las futuras demandas de su desempeño profesional y progresar humana y académicamente. El profesor debe realizar el esfuerzo necesario para adaptarse a la nueva metodología docente, al mismo tiempo que estimula el protagonismo del estudiante.

Si bien el profesor continúa siendo fundamental, su papel se desplaza cada vez más hacia el de un consejero, orientador y motivador. El profesor ha pasado de ser el protagonista principal de la enseñanza, supervisor y evaluador de trabajos y conocimientos, a ser un acompañante en el proceso de aprendizaje, que ayuda al estudiante a alcanzar ciertas competencias. En todo caso, en la práctica, la nueva metodología le va a suponer una mayor inversión de tiempo para conseguir los objetivos.

2.4.3. El método docente

Los condicionamientos que suponen la pérdida de protagonismo del profesor frente a un alumno activo y participativo, conllevan la necesidad de cambios drásticos en cuanto al enfoque de las actividades formativas así como a los materiales de enseñanza. Esto dará lugar a una gran variedad de "situaciones didácticas" que estimulen el compromiso del estudiante.

En el desarrollo de una metodología bajo la perspectiva del crédito ECTS, se define el concepto de **tarea** como la propuesta de trabajo que un docente realiza a un estudiante para organizar un proceso de enseñanza. Las tareas deben estar estrechamente relacionadas con las competencias existiendo una relación explícita e intencionada entre las tareas propuestas y las competencias a lograr. El conjunto de las tareas propuestas debe abarcar todas las competencias a conseguir, es decir, para todas las competencias propuestas han de programarse sus correspondientes tareas.

Respecto a los recursos pedagógicos en el sistema ECTS siguen existiendo las clases

teóricas y las clases de problemas, pasan a denominarse **prácticas de aula**. Se mantiene el sistema de **tutorías**. La novedad es que se incorporan **seminarios** para discutir temas más concretos en grupos más reducidos.

Se establece un número máximo de alumnos para cada uno de estos tipos de "clases". Así el número máximo de alumnos en las clases teóricas es de 100, en las prácticas de aula 40 y en los seminarios de 15 a 20. En caso de superar estos cupos, los grupos se pueden desdoblar en grupos más pequeños siempre que haya recursos.

A diferencia con los planes anteriores, en los que el profesor podía distribuir las clases teóricas y de problemas según el desarrollo del temario y el ritmo de la clase, en los nuevos Grados viene determinado cuándo deben impartirse las clases teóricas, las prácticas de aula, o los seminarios. Por esta razón los horarios deben realizarse con especial cuidado para que todos los alumnos hayan visto la misma cantidad de materia al cabo de cierto período de tiempo, por ejemplo al finalizar la semana, y así evitar desfases entre los distintos grupos.

Clases teóricas

El sistema ECTS determina que las clases teóricas abarcan como máximo el 60 % del total de las horas lectivas.

En el planteamiento de las clases teóricas el profesor debe asegurarse de que los estudiantes sean capaces de seguir en todo momento sus explicaciones. Por esta razón, la exposición de los temas debe ser adecuada al nivel del curso y la construcción de las explicaciones debe estar claramente estructurada. Antes del comienzo de una explicación debe quedar claro cuáles son los objetivos de ésta y cuáles son las hipótesis de partida. Asimismo, para fomentar el interés del alumno por el tema, es muy importante presentar hechos experimentales concretos en los que sea necesaria la aplicación de los conceptos tratados.

El desarrollo de cualquier asignatura de ciencias, y en particular la Física, puede dar lugar a largos desarrollos y demostraciones matemáticas. Este hecho puede fácilmente distraer al alumno del principal objetivo de la demostración, centrándo excesivamente su atención en la comprensión de los pasos matemáticos que se llevan a cabo en ella. Para evitar esto, en la medida de lo posible, el profesor debe hacer hincapié en el fin que se persigue, así como en la interpretación física de los resultados obtenidos. No obstante, el alumno también debe familiarizarse con las técnicas matemáticas y ser capaz de llevar a cabo los desarrollos matemáticos más importantes que vayan surgiendo. Después de

cada explicación teórica es conveniente resumir lo expuesto, poniendo especial interés en recalcar las hipótesis de partida, las aproximaciones realizadas, el significado de las conclusiones obtenidas y su aplicabilidad. Finalmente, es de gran ayuda presentar varios ejemplos de aplicación inmediata de los resultados y, si es posible, relacionarlos con algún fenómeno conocido para el alumno.

Las demostraciones prácticas o experiencias de cátedra de montaje sencillo y gran valor ilustrativo son ideales para la introducción de ciertos temas teóricos, a la vez que sirven para hacer énfasis en el carácter experimental de la Física e imprimen cierto dinamismo a las clases de teoría.

Un aspecto primordial a tener en cuenta durante el transcurso de las clases teóricas es la asimilación de los contenidos por parte del alumno. Para comprobar el grado de captación de los conceptos es útil plantear cuestiones durante el transcurso de las explicaciones. Este método tiene una doble misión: por un lado permite comprobar el nivel de asimilación de los contenidos por los estudiantes y, por otro lado, exige de éstos un esfuerzo de reflexión durante la explicación que facilita la mejor asimilación de ésta. Por otra parte, el profesor debe estimular a los alumnos para que pregunten sobre cualquier punto oscuro de la explicación y que expongan cualquier duda surgida durante la misma.

La presentación de los temas que forman parte del curso debe seguir un esquema lógico de tal forma que el alumno disponga de las herramientas necesarias para abordar un nuevo tema. Cuanto menor sea el número de conceptos que el alumno deba asumir como conocidos, más profundo será el aprendizaje de la asignatura. En general, se trata de que, en la medida de lo posible, el curso sea autocontenido, lo que hace comprender al estudiante que se trata de una disciplina coherente y bien estructurada, basada en unos principios claros y bien establecidos.

Los recursos materiales en las exposiciones teóricas son fundamentalmente la pizarra y los medios audiovisuales (el retroproyector de transparencias y un ordenador con un cañón). La pizarra es un elemento imprescindible para la exposición de desarrollos matemáticos o esquemas sencillos. El retroproyector de transparencias y el ordenador con cañón, con los que se cuenta en todas las aulas de la Facultad de Ciencia y Tecnología, es de gran utilidad para visualizar esquemas y figuras complejas.

Uno de los problemas que plantean las lecciones magistrales es que, en muchas ocasiones, los alumnos no siguen las explicaciones, sino que se centran más en tomar notas, limitándose a copiar lo que el profesor escribe en la pizarra. Es por ésto que se considera muy conveniente suministrar con antelación al estudiante fotocopias de las trasparencias o los ficheros electrónicos con las figuras que se mostrarán y/o un esquema de los apuntes

que se desarrollarán en clase. Esta decisión puede ser discutible desde algunos puntos de vista, y soy claramente consciente de estos potenciales inconvenientes. El principal riesgo es que el alumno decida sustituir las clases presenciales por otras actividades.

Por otro lado, considero que existen ventajas en esta manera de proceder. La entrega previa al estudiante de un material con el contenido de las clases permite al profesor (quizás cándidamente) asumir que el alumno interesado ha consultado al menos de qué se le va a hablar. La no necesidad de copiar *apuntes* permite al alumno concentrarse en la explicación, ampliar las notas de clase con sus propios gráficos o explicaciones, etc.. Mi experiencia personal es positiva respecto al balance neto de esta política de entregar por anticipado el material docente, y también ha sido muy positivamente valorada por mis alumnos. Este material lo he puesto a su disposición en forma de documentos PDF accesibles a través da la plataforma *Moodle* de la Universidad.

Debido a la diferente extensión de los temas del programa, resulta complicado preparar unidades didácticas cerradas para cada clase de 50 minutos. Es por ello que al principio de cada clase debe revisarse lo último que se vió en la clase anterior de forma que los alumnos se centren en la explicación. Asimismo, al final de cada clase además de recapitular sobre los puntos discutidos, también debe hacerse un breve comentario sobre lo que se abordará en la siguiente clase en conexión con el contexto del tema.

Prácticas de Aula (PA)

La resolución de problemas y el análisis de cuestiones son un medio ideal para poner en práctica los conocimientos adquiridos en las clases teóricas, por lo que deben ocupar una parte importante del curso. Los ejercicios prácticos constituyen una forma eficaz de asimilar y madurar conocimientos, a la vez que un método insustituible para poner de relieve detalles difíciles de resaltar en las explicaciones teóricas. El desarrollo académico de la Física sin el planteamiento y resolución de problemas, además de resultar aburrido, es inútil.

Además de señalar a los estudiantes la conveniencia de utilizar libros de problemas indicados en la bibliografía, es interesante que el profesor proponga una serie de problemas por cada tema. Los problemas propuestos deben corresponder con lo explicado en las clases de teoría y estar adaptados al nivel del estudiante. Considero conveniente incluir con cada problema las soluciones algebráicas o numéricas del mismo, de forma que el alumno pueda comprobar que lo ha resuelto satisfactoriamente.

Un problema bien elegido debe ser ilustrativo del tema que trata, ha de dar lugar a

debate y de él se han de extraer conclusiones interesantes. Después de un tiempo razonable para su resolución, se debe proceder a su corrección en clase. Para que las clases de problemas sean fructíferas es absolutamente indispensable la participación activa de los estudiantes. En los grupos pequeños deben ser ellos los que corrijan los ejercicios en la pizarra mientras los demás alumnos y alumnas realizan los comentarios o preguntas que crean oportunas. Evidentemente, este proceso debe ser guiado por el profesor, quien a su vez debe plantear durante la corrección cuestiones que exijan al alumno un esfuerzo de reflexión. De esta forma se logra, por otra parte, una interacción mayor entre los estudiantes y el profesor, y éste puede obtener información sobre el grado de asimilación de los contenidos por su parte. Un aspecto sobre el que se debe incidir a menudo durante el curso es la importancia de que el estudiante trate de solucionar los problemas por sí mismo, y no se limite a observar cómo los soluciona el profesor. Esta última manera de proceder provoca una sensación equivocada de dominio de la asignatura y suele suponer un fracaso a la hora de afrontar los exámenes.

Tutorías

Los estudiantes disponen de seis horas semanales dedicadas a las tutorías, en las cuales pueden dirigirse al profesor para aclarar cualquier duda sobre la asignatura. Es tarea del profesor fomentar y potenciar el uso de las tutorías, de gran valor tanto para el alumnado como para el profesor, a la hora de calificarlos. Sin embargo, mi experiencia personal es que no importa lo que se insista a lo largo del curso para que acudan a las tutorías. Los estudiantes en general esperan a la víspera del exámen para hacerlo, lo que demuestra que aún no han adoptado el papel que les corresponde en el proceso de enseñanza-aprendizaje.

Seminarios

Se programan sobre distintos formatos, dependiendo del ritmo y las necesidades puntuales del curso. Se utilizan para plantear problemas abiertos, simulaciones informáticas, realización de trabajos, etc. Se pueden plantear en tres fases:

- 1. Los estudiantes en horario no presencial y en grupos pequeños realizan una primera aproximación al problema.
- 2. En sesiones de tutoría o de seminario el profesor orienta el trabajo de los distintos grupos.

3. En sesiones sucesivas de seminario con todos los grupos, los alumnos y alumnas entregan un informe escrito, se realiza una puesta en común y se expone el trabajo.

En particular, se propone la realización de una simulación de ordenador de algún problema físico sencillo que se haya estudiado durante el curso y que implique la resolución de ecuaciones diferenciales (algunas de las cuales los alumnos de primer curso no son aún capaces de resolver). Será una tarea a realizar en grupo durante la segunda mitad del segundo cuatrimestre de la asignatura. Estas simulaciones se realizarán con el lenguaje de programación *python* que los estudiantes han aprendido durante el primer cuatrimestre del curso en la asignatura *Introducción a la Computación*.

Moodle y la comunicación on-line

Desde hace unos años, la universidad dispone de un campus virtual del que dependen aulas virtuales de apoyo a la docencia presencial gestionadas a través de la plataforma Moodle. Todos los estudiantes matriculados en la asignatura son automáticamente matriculados en el aula virtual. Las principales secciones de las que se hace uso son:

- Cuestionarios de autoevaluación (auto-tests): Tras finalizar cada tema o un bloque de cada tema cada estudiante realiza un test de 10 cuestiones de opción multiple con una sola respuesta correcta. Al cerrarse el cuestionario los alumnos y alumnas obtienen su puntuación y la respuesta correcta a todas las preguntas.
- **Ficheros**: En esta sección los alumnos y alumnas encuentran los apuntes, esquemas, el listado y la solución de los problemas desarrollados en clase, así como cualquier otro documento que tanto el profesor como los estudiantes consideren de interés en relación con la asignatura. Están organizados por temas.
- Enlaces: En cada tema pueden añadirse enlaces a páginas web interesantes, con aplicaciones sencillas de lo explicado en clase, simulaciones y *applets*, figuras en tres dimensiones. . . .
- Foros: En los foros tanto los estudiantes como el profesor pueden plantear preguntas y proponer respuestas. El estudiante tiene la posibilidad de recibir todos los mensajes en su correo electrónico.
- Noticias: Esta sección está dedicada a la publicación, de aquellas noticias relacionadas con el curso: anuncio de exámenes, publicación de notas, anuncio de conferencias, ... El estudiante recibe las noticias en su correo electrónico.

Calendario: El profesor puede marcar en el calendario fechas señaladas, como fechas de controles o examenes, fechas de entrega de ejercicios, Permite además que los estudiantes reciban por correo electrónico un recordatorio de las fechas señaladas.

El acceso a *Moodle*, así como a Internet, por parte de los alumnos y alumnas no debería suponer problema alguno para ninguno de ellos, ya que tanto en la Facultad como en la Biblioteca del Campus existe un número suficiente de ordenadores a su disposición. Todos los estudiantes reciben una cuenta de correo electónico corporativa, así como claves para acceder a la intranet de la universidad. Debido a que los alumnos y alumnas deben acceder a esta plataforma introduciendo un nombre de usuario y una contraseña y todo queda registrado, el profesor puede conocer su utilización por parte de cada estudiante, y le permite hacer un seguimiento personal de la evolución de cada uno a través de sus intervenciones.

Prácticas de laboratorio

Las prácticas de laboratorio son esenciales en el aprendizaje de la Física y proporcionan al estudiante una idea más realista sobre los conceptos adquiridos en las clases teóricas. Es por ello que, aunque la asignatura *Técnicas Experimentales I* en la que se realizan las prácticas, no constituye el objeto de este Proyecto Docente, se citan aquí como un recurso metodológico más.

La enseñanza de la Física, como ciencia experimental que es, debe realizarse de tal manera que se transmita al alumno, tanto en las clases teóricas como de problemas o de laboratorio, la idea de que los resultados de la Física son fruto de la observación detallada de la naturaleza y que, en líneas generales, el origen de las teorías físicas hay que buscarlo en leyes empíricas. Además, es en estas clases donde el alumno tiene ocasión de participar más activamente y establecer una relación más directa con el profesor.

Hay que tener en cuenta que esta es la primera vez que el alumno se va a introducir en un laboratorio de Física, y por tanto habrá que dedicar un tiempo a que se familiarice con las actividades de tipo práctico, instrumentos básicos de medida, cálculo de errores, análisis y discusión de datos, realización de informes de laboratorio, etc... Por ello es importante incluir en la programación algunas sesiones de introducción al laboratorio sobre aspectos como el cálculo de errores, representación gráfica e instrumentos de medida, sin olvidar por otra parte las normas básicas sobre la correcta utilización de los aparatos, así como de la seguridad en el laboratorio.

Antes de comenzar una práctica es importante que el alumno entienda los fundamentos en los que se basa y los objetivos que se persiguen con ella. Debe contar con la suficiente antelación con un guión esquemático y claro de lo que se pretende con la práctica y del modo de proceder. Una vez realizada la práctica, el alumno deberá entregar al profesor un informe detallado de la misma, en el que presente los resultados obtenidos y realice un análisis crítico de los mismos y de la práctica en sí, sobre sus limitaciones e incluso posibles mejoras.

El diseño de las prácticas debe ser el adecuado para que el alumno se vea obligado a reflexionar sobre los resultados obtenidos y no debe presentar una complejidad excesiva para que no pierda de vista los objetivos de las mismas. El conjunto de las prácticas debe abordar la mayor parte posible del contenido teórico y su principal misión será la de desarrollar, en conjunto, una actitud sistemática y práctica en el estudiante.

2.5. La evaluación

Por último, es importante hacer referencia al método de evaluación de la asignatura. Es evidente que los métodos de evaluación afectan no sólo a la calidad del aprendizaje, sino también a la actitud de los estudiantes hacia la materia de estudio.

Como consecuencia de la innovación que supone la aplicación del "Plan Bolonia", el cambio se debe reflejar en la evaluación del estudiante que de estar centrada en el "conocimiento declarativo" como referencia dominante y a veces única, pasa a incluir una evalución basada en las competencias, capacidades y procesos estrechamente relacionados con el trabajo y las actividades que conducen al progreso del estudiante y de una manera formal se traducen en la evaluación continua.

Un método de evaluación ideal estaría basado en un conocimiento individualizado del estudiante, de tal forma que fuera posible llevar a cabo un seguimiento personalizado día a día de cada uno de ellos. La observación diaria de la evolución de cada estudiante elimina errores de evaluación que inevitablemente aparecen en las calificaciones de los exámenes finales.

Hasta ahora, dado el número de alumnos y alumnas matriculados por término medio en cada grupo de esta asignatura (alrededor de 80), no resulta físicamente posible para ningún profesor que tenga varios grupos de docencia a su cargo utilizar el método de evaluación continua por diversos motivos: En primer lugar, algunos alumnos (especialmente los repetidores) no asisten de forma habitual a clase. En esas condiciones, no es posible realizar un seguimiento de su evolución. Por otro lado, aún entre los que asisten, muchos de ellos rehuyen salir a la pizarra, especialmente en el primer curso de grado. Por tanto, el seguimiento de la evolución de los alumnos es muy problemático. Existe la vía alternativa de corregir las hojas de problemas de todos los alumnos, pero esa es una tarea fuera del alcance de un profesor con dos o tres grupos de tantos alumnos cada uno, como ha sido mi caso en el último año.

Desde la perspectiva del EEES la evaluación se concibe como un instrumento integrado en el proceso de enseñanza-aprendizaje que proporciona retroalimentación al estudiante (información precisa sobre las áreas en las que debe mejorar), y al profesor (indicándole los cambios que debe realizar para mejorar sus métodos). Para que la evaluación pueda realizar una papel orientador e impulsor del trabajo de los alumnos y alumnas debe ser percibida por éstos como ayuda real, generadora de expectativas positivas.

Además, debe extenderse a todos los aspectos conceptuales, procedimentales y actitudinales. Por otro lado, ha de hacerse una evaluación continua a lo largo de todo el proceso

y no limitarse a una evaluación terminal.

Este es quizás uno de los mayores cambios que supone la aplicación de la nueva metodología del sistema EEES, ya que explícitamente se alude a la necesidad (obligatoriedad) de realizar una evaluación continua del progreso del estudiante universitario. Por esta razón el estudiante, repetidor o no, no podrá optar por no asistir a clase, ya que gran parte de su evaluación procederá de tareas realizadas en clase, y la no asistencia le acarreará una valoración no positiva en los indicadores evaluadores de ciertas competencias. Además el proceso de evaluación no debe limitarse a comprobar la progresión del estudiante en la adquisición de conocimientos. El sistema se encamina más hacia la verificación de las competencias (en el sentido de "demostrar ser competente para algo") obtenidas por el propio estudiante en cada materia, con su participación activa en un proceso continuo.

Como instrumentos concretos en la evaluación nos referiremos a: exámenes, controles auto-test online y simulaciones de ordenador.

Examen

El examen debe suponer la culminación de una revisión global de la materia considerada y debe incluir actividades coherentes con las utilizadas en el proceso de enseñanza-aprendizaje, abarcando los contenidos conceptuales y procedimentales.

Es conveniente que el examen sea corregido lo antes posible y se discutan las posibles respuestas, los errores cometidos, la persistencia de preconcepciones, etc. De este modo el examen se convierte en una buena actividad de autorregulación. Sería de utilidad que los estudiantes como trabajo no presencial, rehagan el examen y lo conserven como material de referencia y consulta.

El planteamiento del examen debe ser realizado de una manera cuidadosa, ya que debe tener un grado de dificultad acorde con el nivel del curso, el enunciado debe ser claro y los resultados no deben presentar ambigüedades. Se planteará un examen de respuestas abiertas, pero concretas. En general, los exámenes exclusivamente de tipo test no parecen los más recomendables para las asignaturas de Física. Por otro lado, el número de alumnos y alumnas que se presenta a estos exámenes no es excesivamente alto, por lo que la economía de medios que suponen los exámenes de tipo test no está completamente justificada en este caso.

El tiempo de realización del examen por parte de los estudiantes no conviene que sea muy ajustado, para no añadir a la dificultad del propio examen la presión que supone la premura de tiempo.

En general, el núcleo del examen debe estar constituido por problemas y cuestiones conceptuales, evitando los exámenes que requieran un esfuerzo esencialmente memorístico para el estudiante. Debe estar estructurado de forma que aparezcan diferentes niveles de dificultad y abarcar una parte representativa de los temas correspondientes a la asignatura. Por último, es conveniente evitar la aparición de desarrollos farragosos en su resolución, y debe permitir al profesor utilizar criterios objetivos a la hora de proceder a su corrección.

Controles

Llamamos controles a aquellos ejercicios realizados durante una hora de clase y que el alumno debe entregar al profesor al finalizar la clase. Se trata de uno o dos ejercicios no demasiado extensos que el alumno debe realizar individualmente sin posibilidad de consultar sus notas ni ningún libro.

La principal finalidad de estos "mini-examenes" es concienciar al alumno para que lleve la asignatura "al día", es decir, que haga un trabajo continuado y no espere al momento del examen para estudiar la asignatura en profundidad.

Cada control se corrige en común en una sesión de prácticas de aula y una vez que el profesor ha revisado todos los controles, los estudiantes tienen la posibilidad de discutir y comentar su ejercicio con el profesor en horas de tutoría.

Basándome en mi experiencia de años anteriores he constatado que el resultado del primer control ayuda a muchos alumnos a darse cuenta de que quizás no estudian de forma adecuada o no dominan la materia como ellos creían. Así, los controles se convierten también en un buen mecanismo de autorregulación para el estudiante.

Auto-tests online

Al final de cada tema o de cada bloque de un tema, cada alumno realiza un test de 10 cuestiones. Para cada cuestión se proponen cinco posibles respuestas de las cuales solo una es correcta. En general se trata de preguntas cortas, tanto conceptuales como numéricas.

La finalidad del test es que los estudiantes repasen el tema que se ha tratado en el aula recientemente. Es una tarea no presencial y disponen de 5 o 6 días para realizarla y enviarla a través de la plataforma Moodle, de forma que pueden dedicar el tiempo que necesiten para consultar sus notas, libros o discutir las cuestiones con sus compañeros o incluso con el profesor.

Cada una de las 10 cuestiones corresponde a una sección del tema. Para cada sección se preparan más de 5 preguntas y a cada estudiante se le asigna una sola pregunta de cada sección de forma aleatoria. En los tests de un aula virtual se barajan las preguntas y las respuestas dentro de cada pregunta. De esta forma la probabilidad de que dos estudiantes tengan el mismo test es mínima.

Una vez finalizado el plazo de entrega del test los alumnos pueden visualizar sus calificaciones, asi como las soluciones correctas del test que han realizado, y pueden discutir con el profesor todas las dudas que les surjan.

Tabla de evaluación

A continuación se detalla las competencias que se evaluan mediante los instrumentos mencionados y el valor que se le asigna a cada método de 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

- La nota mínima que debe obtenerse en el examen es un 4 (sobre 10).
- En el caso de que la calificación de los auto-tests reduzca la nota promedio del curso, no se tendrán en cuenta y el valor del examen será del 75 %. Para poder aplicar esta excepción el alumno debe realizar como mínimo el 75 % de los auto-tests y debe obtener una nota promedio superior a 5 en los tests realizados. De esta forma se evalúa de manera más justa a aquellos alumnos que durante el curso han progresado y mejorado.

2.6. Contenidos

En el marco del EEES, y para facilitar la movilidad entre titulaciones de una misma rama de conocimiento se establecen contenidos formativos comunes a varias titulaciones. Esta formación común no consiste en cursos idénticos para todas las titulaciones sino conocimientos básicos compartidos o competencias comunes a todas ellas.

La *Física General* de la Facultad de Ciencia y Tecnología de la UPV/EHU es común para los Grados en Física, Ingeniería Electrónica, y Matemáticas. Es una asignatura anual de 12 ECTS que se imparte durante 2 cuatrimestres de 15 semanas cada uno. Se proponen 36 clases magistrales y 21 clases de prácticas de aula por cuatrimestre. Las 6 clases restantes se realizarán en formato seminario, 2 en el primer cuatrimestre y 4 en el segundo.

Con respecto al plan anterior, el número de horas presenciales de Física de primer curso para el Grado en Matemáticas no se modifica. Sin embargo, los Grados en Física e Ingeniería Electrónica reciben una hora menos por semana. Dado que el contenido está basado fundamentalmente en el programa de *Fundamentos de Física* de la Licenciatura en Física del plan 2000-2001, ha sido necesario ajustar los contenidos del programa para cumplir el número de créditos asignado.

En cuanto a la asignatura práctica de laboratorio, contendrá únicamente prácticas de Física con la denominación *Técnicas Experimentales I*.

A continuación se especifica el programa de *Física General* y *Técnicas Experimenta- les I*, adaptado al sistema ECTS.

2.6.1. Programa de teoría: Física General

Antecedentes y justificación

El programa de la asignatura *Física General*, objeto del concurso, contiene, en principio, gran parte de la Física a nivel básico.

El programa que presento a continuación está basado en el de la asignatura *Fundamentos de Física* del plan de estudios 2000-2001. La implantación del plan de estudios en el curso 2000-2001 ya supuso una reducción en el número de créditos asignado a la asignatura *Fundamentos de Física* con respecto a la asignatura *Física General* del plan anterior, de 18 créditos (6 horas semanales) a 15 créditos (5 horas semanales), lo que implicó un recorte del programa de la *Física General* "tradicional". Es importante señalar, que esta modificación del temario no se produjo de forma arbitraria, sino que se realizó teniendo

en cuenta los contenidos del programa oficial de "Física" de 2° de Bachiller (Vibraciones y Ondas, Óptica, interacción gravitatoria, e introducción a la Física Moderna) y el contexto en el que se enmarcaba la asignatura *Fundamentos de Física* dentro de la Licenciatura en Física.

De este modo, teniendo en cuenta la composición de aquel plan y la reducción de créditos impuesta en el programa de la asignatura *Fundamentos de Física*, se modificaron los siguientes temas correspondientes al programa de *Física General* del plan anterior al 2000:

- Estática y dinámica de fluidos. Se eliminó este capítulo por la mayor importancia que adquirió esta materia en el plan 2000-2001, al aparecer explícitamente en las asignaturas *Mecánica y Ondas* de segundo curso y *Física de los medios continuos* de tercero.
- **Termodinámica**. Se suprimió por completo la parte dedicada a la Termodinámica debido a que, como ya ocurría en el plan antiguo, la asignatura *Termodinámica* del segundo curso partía desde principios básicos.
- Introducción a la Física Cuántica. Se eliminó por la presencia en el plan 2000-2001 de una nueva asignatura denominada Introducción a la estructura de la materia que, fundamentalmente, es una introducción a la Física Moderna, que no existía en el plan anterior.
- Dinámica del Sólido Rígido: Con la implantación del plan de estudios 2000-2001 el número de horas dedicadas al estudio del sólido rígido se vió reducido, limitándose al estudio de la rotación de un sólido alrededor de sus ejes principales de inercia, teorema de Steiner, radio de giro, energía cinética del sólido, movimiento de rodadura y condiciones de equilibrio de un cuerpo rígido. La parte eliminada, que correspondía al estudio del tensor de inercia, ángulos de Euler, ecuaciones de movimiento y movimiento giroscópico se desarrollaría en la asignatura *Mecánica y Ondas* de segundo curso.
- **Óptica**: Esta parte se vió reducida y limitada al estudio de la óptica geométrica, ya que en la asignatura *Óptica* de tercer curso se presuponían unos conocimientos mínimos al respecto.

El nuevo Grado en Física ha impuesto en la asignatura *Física General* una nueva reducción en el número clases presenciales semanales, de 5 a 4 horas, y su objetivo no

es abarcar *toda* la Física General "tradicional", sino que pretende establecer unas bases sólidas de conocimiento y razonamiento que le sirvan al alumno para abordar con éxito las materias en la que se profundizará en los cursos superiores.

A pesar de la reducción de horas presenciales de la asignatura en el grado, el contenido respecto al plan de 2000-2001 no se ha reducido sustancialmente. Al contrario. Se ha recuperado el tema correspondiente a la estática y dinámica de fluidos de forma que los estudiantes del Grado en Matemáticas e Ingeniería Electrónica tengan una formación básica en esta área ya que no cursarán la asignatura optativa *Física de los medios continuos* en 3° o 4° curso.

Debido a la extensión del programa, he creído conveniente dividirlo en tres bloques: Introducción, Mecánica y Electromagnetismo. Estos tres bloques temáticos tienen entidad propia, si bien el estudio de algunos de ellos requiere unos conocimientos adquiridos previamente. Sobre algunos de los temas los estudiantes ya tienen alguna información básica recibida en Bachiller, en particular del bloque dedicado al Electromagnetismo. Sin embargo, el bloque dedicado a la Mecánica supone una mayor dificultad para gran parte del alumnado. Una de las razones es que, en la actualidad, la asignatura *Mecánica* ya no se imparte en Bachiller. Por otra parte, todos los bloques temáticos aquí presentados corresponden a asignaturas completas de cursos superiores.

El programa actual de *Física General* comienza con una introducción sobre la naturaleza y método de la Física, seguida por un conjunto de temas dedicados al álgebra vectorial. El segundo bloque corresponde al estudio de la Mecánica, que se volverá a ver en el segundo curso con un enfoque más elevado: formalismo lagrangiano y hamiltoniano. A continuación se incluye un apartado sobre el Electromagnetismo, disciplina que en cursos superiores se desdobla en varias asignaturas, por un lado *Electromagnetismo I y II* en el segundo y tercer curso respectivamente, y por otro, *Óptica* en el tercer curso del grado. En ambos casos se presuponen unos conocimientos previos por parte de los alumnos que cursen los Grados en Física e Ingeniería Electrónica.

Esquema del programa teórico

I - INTRODUCCIÓN

1. Naturaleza y método de la Física

(0.1 ECTS)

- ¿Qué es la Física?
- El método científico.
- Partículas e interacciones.
- La estructura de las leyes físicas, simetría y leyes de conservación.
- El Mundo material: estados de agregación de la materia.

2. Magnitudes Físicas y vectores

(0.4 ECTS)

- Magnitudes físicas. Escalares y vectores.
- Magnitudes fundamentales y derivadas. Ecuación de dimensiones. Análisis dimensional.
- Ordenes 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

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.

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 en el caso general.

5. Dinámica del punto material

(0.6 ECTS)

- Principio de inercia: primera ley de Newton. Sistemas de referencia inerciales.
- Momento lineal. Masa inercial.
- Definición de fuerza: segunda ley de Newton. Principio de conservación del momento lineal.
- Ley de acción-reacción, tercera ley 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.

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.

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.

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.

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: Orbitas circulares y órbitas elípticas. Excentricidad y energía.

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 Bernouilli y aplicaciones.

Viscosidad. Ley de Poiseuille.

11. Movimiento oscilatorio

(0.4 ECTS)

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

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.

III - ELECTROMAGNETISMO

13. Interacción electrostática

(0.9 ECTS)

- Introducción.
- Carga eléctrica. Conservación y cuantificación de la carga eléctrica. Estructura del átomo.
- Ley de Coulomb. Campo eléctrico. 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.

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.

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.

16. Interacción magnética

(1 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.

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. Analogía con el movimiento armónico. Resonancia.
- Circuitos de corriente alterna.
- Corriente de desplazamiento de Maxwell. Ley de Ampère-Maxwell.
- Ecuaciones de Maxwell.

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.

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.

Programa teórico comentado

En esta sección se comentan de forma detallada todos los capítulos del programa de teoría, destacando los aspectos más importantes de los mismos.

I - INTRODUCCIÓN

- 1. Naturaleza y método de la Física. Este capítulo, de carácter introductorio, comienza con una visión general e histórica de la Física. Se establecen los objetivos que dicha ciencia persigue y los procedimientos utilizados para ello. En particular se hace hincapié en el carácter experimental de la Física, y en la utilización del método científico como procedimiento adecuado para el establecimiento de las leyes de la naturaleza.
- 2. Magnitudes Físicas y vectores. Se introducen los conceptos de magnitud, unidad, orden de magnitud y número de cifras significativas, y se efectúa una revisión de los principales sistemas de unidades y las relaciones entre los mismos. A continuación se definen los vectores libres y las operaciones más importantes entre vectores y entre vectores y escalares, mostrando ejemplos sencillos de su aplicación posterior. Se definen los distintos sistemas de coordenadas y se introduce el concepto de campo escalar y campo vectorial. Se finaliza con la derivada y la integral de un vector respecto a un escalar.

II - MECÁNICA

- 3. Cinemática del punto material. Con este capítulo se inicia el estudio de la mecánica. Se revisan los conceptos de partícula y sistema de referencia, y se estudia el movimiento desde un punto de vista puramente geométrico, sin atender a las causas que lo producen. Se definen los conceptos de posición, velocidad, aceleración, y su naturaleza vectorial, y se formulan las ecuaciones generales del movimiento. A continuación se estudian algunos ejemplos: movimiento en una dimensión con velocidad constante, con aceleración constante y con aceleración conocida dependiente del tiempo y se extiende el análisis a dos dimensiones: tiro parabólico y movimiento circular. Finalmente se presta atención al movimiento curvilíneo en el plano y su descripción en coordenadas polares, por su posterior aplicación al estudio del movimiento bajo fuerzas centrales, y en particular, al estudio del movimiento planetario.
- **4. Movimiento relativo.** Se describe el movimiento relativo desde el punto de vista cinemático. Se obtienen las transformaciones que relacionan los vectores de posición,

velocidad y aceleración de una partícula con respecto a dos sistemas de referencia en movimiento relativo de traslación (transformaciones de Galileo), movimiento relativo solo de rotación o general (traslación y rotación). Mediante una serie de ejemplos, como el péndulo de Foucault, se resalta la importancia del movimiento relativo de rotación.

- 5. Dinámica del punto material. En este capítulo se introducen los principios y conceptos de la mecánica newtoniana aplicándola en el caso más sencillo, el de una única partícula puntual. En primer lugar se enuncia la ley de la inercia y se definen los sistemas de referencia inerciales. A continuación se introduce el concepto de masa inercial y se definen el momento lineal y la fuerza, a partir de los cuales se enuncian la segunda y tercera leyes de Newton. Como ejemplos de aplicación se establecen las ecuaciones de movimiento para algunos sistemas con diferentes tipos de fuerzas: los casos más sencillos de fuerzas constantes a distancia y de contacto así como el de una fuerza variable, como por ejemplo el rozamiento en un fluido. Así, con el ejemplo de un paracaídas se introduce el concepto de velocidad límite. Seguidamente se define el momento angular y el momento de una fuerza para estudiar posteriormente el movimiento de una partícula sometida a una fuerza central y enunciar el teorema de conservación del momento angular. Finalmente, mediante ejemplos concretos como el de una bombilla colgada en un tren, lanzamientos desde una plataforma giratoria, etc..., se analiza el movimiento de una partícula desde un sistema de referencia no inercial, definiendo las denominadas fuerzas de inercia.
- 6. Trabajo y energía. Se definen el trabajo realizado por una fuerza sobre una partícula y la energía cinética, estableciéndose la relación entre ambos. En especial, se estudia el caso de las fuerzas conservativas, introduciendo los conceptos de energía potencial y de energía mecánica para enunciar el principio de conservación de la energía mecánica. Seguidamente se utilizan las nuevas magnitudes definidas para estudiar el movimiento de una partícula en casos particulares, desde el punto de vista de la conservación de la energía (movimiento bajo una fuerza constante en una dimensión y movimiento bajo el efecto de una fuerza que cumple la Ley de Hooke). Se debe hacer especial hincapié en que esta nueva forma de obtener la trayectoria de la partícula proviene directamente de las leyes de la dinámica y es, por tanto, equivalente a ellas. Finalmente se analiza el movimiento de la partícula a partir de curvas de energía y se estudian ejemplos en los que intervienen fuerzas no conservativas.
- 7. Dinámica de los sistemas de partículas. En este capítulo se extiende el análisis

dinámico a sistemas compuestos por varias partículas puntuales. En primer lugar se hace la distinción entre fuerzas internas y externas del sistema y se define el centro de masa del mismo. A continuación se enuncian y demuestran los teoremas de conservación del momento lineal, del momento angular y de la energía mecánica. Se realiza el análisis desde el sistema de referencia del laboratorio y desde el sistema de referencia del centro de masa, señalando la conveniencia de separar el movimiento respecto a cualquier sistema de referencia en dos partes: el del centro de masa y el movimiento propio del sistema (relativo a su propio centro de masa). Finalmente se estudian algunos casos de particular interés: el problema de dos cuerpos y su reducción al de un solo cuerpo previa definición de la masa reducida, las colisiones entre dos partículas tanto en una como en dos dimensiones y los sistemas de masa variable (cohetes).

- 8. Dinámica del sólido rígido. El sólido rígido es un caso muy especial de sistema de partículas, por lo que es preferible estudiarlo en un capítulo aparte. En el caso ideal, las distancias entre las partículas que componen el sistema permanecen constantes, lo que reduce el número de grados de libertad, haciéndose patente la necesidad de introducir nuevas técnicas en su estudio. En primer lugar se estudia la cinemática del sólido rígido, para la cual se introduce el sistema de referencia propio, se señalan los grados de libertad del sistema y se analiza el campo de velocidades. A continuación se plantean las ecuaciones dinámicas del sistema, se define el momento de inercia y se calcula para algunas simetrías. Se aplica la fórmula de Steiner para calcular los momentos de inercia respecto a ejes arbitrarios paralelos a los principales. Seguidamente se obtiene la expresión para la energía cinética del sólido, separándola en dos partes: la energía cinética de traslación y la de rotación, analizando el caso particular del movimiento de rodadura. Finalmente se aborda el problema de la estática, estableciendo las condiciones de equilibrio del sólido rígido aplicándolas a algunos ejemplos en dos y tres dimensiones.
- 9. Interacción gravitatoria. Como caso particular de un sistema de dos cuerpos, en este tema analizaremos uno de los problemas más interesantes en la historia de la Física: la interacción gravitatoria y el movimiento planetario. Se repasan brevemente los antecedentes históricos que condujeron al enunciado de las leyes de Kepler y a la ley de la gravitación universal. Se señala la diferencia conceptual entre masa inercial y masa gravitatoria, se enuncia el principio de equivalencia a partir del cual se introduce la constante de gravitación universal y se describe el experimento de Cavendish. Seguidamente se definen el campo gravitatorio y el potencial gravitatorio para describir la interacción a distancia, y se calculan los campos y potenciales creados por objetos de

geometría sencilla. Finalmente, se estudia en detalle el problema de dos cuerpos con fuerzas centrales, se resuelve la ecuación de movimiento, se obtiene la ecuación de las órbitas y se estudia el movimiento de los planetas y satélites.

- 10. Fluidos. En este tema se comienza con la clasificación de los fluidos y sus propiedades. Se estudia la hidrostática, obteniendo la ecuación fundamental de la hidrostática y la ley de Arquímedes. A continuación se define el flujo de un campo vectorial para pasar a la parte de hidrodinámica e introducir la ecuación de continuidad y la ecuación de Bernouilli para los fluidos ideales y sus aplicaciones. Finalmente se trata la viscosidad y la ley de Poiseuille.
- 11. Movimiento oscilatorio. Se introduce el concepto de oscilador, destacando su importancia como modelo en muchos problemas de física. En primer lugar se analiza el ejemplo de una partícula sujeta a un resorte lineal que satisface la ley de Hooke. Se plantea la ecuación de movimiento y la de la energía. A continuación se presentan otros sistemas que poseen la misma ecuación dinámica en primera aproximación: péndulo simple, péndulo físico, sistemas ligeramente desplazados de la situación de equilibrio dinámico, etc... Se analiza la composición de movimientos armónicos en una y dos dimensiones. Seguidamente se introduce en el sistema una fuerza de amortiguamiento proporcional a la velocidad y se analizan los diferentes movimientos, en función de la constante de amortiguamiento. Finalmente se añade al sistema una fuerza externa periódica para estudiar las oscilaciones forzadas y los fenómenos de resonancia.
- 12. Movimiento ondulatorio. Para terminar el estudio de la Mecánica se analiza el movimiento ondulatorio en medios materiales. El capítulo comienza con la descripción matemática de la propagación de una perturbación sobre un medio en equilibrio dinámico, obteniéndose la ecuación diferencial que satisface una onda. Después se analiza la propagación en una dimensión, tanto de las ondas longitudinales en una barra metálica como de las ondas transversales en una cuerda. Se obtienen las ecuaciones que satisfacen esos dos sistemas y se comparan con la ecuación de ondas para obtener la velocidad de propagación. Después se introducen las ondas armónicas y se estudia la interferencia de las mismas. A continuación se introducen las ondas estacionarias en una cuerda y en una columna de aire y finalmente se describe el efecto Doppler.

III - ELECTROMAGNETISMO

13. Interacción electrostática. Se comienza el estudio del electromagnetismo con una breve introducción histórica para llegar al hecho experimental de la existencia de la

carga eléctrica, y se enuncian los principios de conservación y cuantificación de la misma. Seguidamente se presenta la ley de Coulomb y se comparan cuantitativamente las interacciones gravitatoria y electrostática en el sistema protón-electrón, con el fin de mostrar la importancia de la segunda frente a la primera. Una vez puesto de manifiesto el carácter conservativo de la interacción se calcula el campo y el potencial electrostáticos. Seguidamente se define el concepto de flujo del campo eléctrico y se deduce la ley de Gauss, que se utilizará para calcular los campos y potenciales debidos a distribuciones concretas de carga. Después se calculará su energía electrostática. A continuación se analiza el dipolo eléctrico como un ejemplo muy importante de distribución de cargas, se introduce el concepto de momento dipolar y se estudia su interacción con un campo electrostático externo. Se realiza una clasificación de los materiales en función de su comportamiento en presencia de un campo electrostático. Se finaliza con un breve análisis del comportamiento de los materiales dieléctricos en presencia de un campo electrostático externo introduciendo el concepto de polarización y densidad de carga de polarización.

- 14. Materiales conductores en campos electrostáticos. En este capítulo se estudian los materiales conductores en equilibrio, su distribución de cargas, y el campo y potencial electrostáticos tanto en su interior como en el exterior. Se introduce el concepto de capacidad y se estudian diferentes tipos de condensadores y los diferentes tipos de combinación de condensadores. A continuación se obtiene la expresión de la energía asociada al campo eléctrico. Para finalizar se estudian las consecuencias de introducir un dieléctrico entre las placas de un condensador de caras planas.
- 15. Corriente eléctrica. Circuitos de corriente continua. Se analiza la conducción eléctrica en régimen estacionario. En primer lugar se definen la intensidad eléctrica y la densidad de corriente para obtener la ecuación de continuidad a partir del principio de conservación de la carga. A continuación se define la conductividad de un material y se enuncia la ley de Ohm que relaciona el campo eléctrico y la densidad de corriente en cada punto. Mediante el modelo de electrones libres de Drude se obtiene la resistividad de un material a partir de parámetros microscópicos: masa y carga de los portadores, el tiempo medio entre colisiones y la densidad. Una vez definida la resistencia se introduce el concepto de fuerza electromotriz y se generaliza la ley de Ohm. Se aplica la ley de Ohm en algún circuito y se analiza la combinación de resistencias. Seguidamente se estudia el efecto Joule y se deducen las leyes de Kirchhoff a partir de la ecuación de continuidad y de la conservación de la energía. Finalmente se utilizarán estas leyes para resolver algunos circuitos.

16. Interacción magnética. En este capítulo se estudia el campo magnético en régimen estacionario. En primer lugar se introduce el concepto de campo magnético a partir de los efectos que produce sobre una carga en movimiento sin mencionar los agentes que lo producen. Se introduce la expresión de la fuerza magnética y se analiza el movimiento de una carga en un campo magnético uniforme. Seguidamente se presentan algunos ejemplos de aplicación de este fenómeno: selector de velocidades para un chorro de partículas cargadas, espectrómetro de masas, ciclotrón, etc... Se extiende la expresión de la fuerza magnética al caso de corrientes eléctricas, en particular sobre espiras planas, y se define el momento dipolar magnético. A continuación se analiza el campo creado por una carga en movimiento y se extiende el análisis al campo creado por una corriente eléctrica estacionaria introduciendo la ley de Biot y Savart. Después se calcula la fuerza entre dos hilos infinitos y paralelos por los que circulan corrientes eléctricas. Se introduce la ley de Ampère y junto con la ley de Biot y Savart se utilizan para determinar el campo creado por diferentes distribuciones de corrientes. En particular, se calcula el campo magnético creado por una espira circular a grandes distancias de su centro, y se compara su dependencia con la del campo eléctrico creado por un dipolo eléctrico. Seguidamente se presenta la ley de Gauss del campo magnético y se discuten las diferencias con el caso eléctrico. Para finalizar se hace una breve discusión del campo magnetostático en un medio material, comenzando por describir el comportamiento de la materia en presencia de un campo magnético externo. Se introducen los conceptos de imanación y de densidad de corriente de imanación. Seguidamente se generaliza la ley de Ampère, definiendo el vector excitación magnética, la susceptibilidad y la permeabilidad magnéticas. A continuación, mediante un sencillo modelo de electrones girando en órbitas circulares alrededor de los núcleos atómicos, se relaciona la imanación de un material con sus características microscópicas. A partir de este modelo se establecen las diferencias entre los materiales diamagnéticos, paramagnéticos y ferromagnéticos.

17. Campos electromagnéticos dependientes del tiempo. En este capítulo se analizan los campos electromagnéticos dependientes del tiempo. Comienza con una descripción de los experimentos de Faraday y tras introducir el concepto de flujo del campo magnético, se enuncian la ley de Faraday-Henry y la ley de Lenz. Se presentan algunas aplicaciones prácticas de dichas leyes como son el generador y el motor eléctrico. A continuación se estudian los fenómenos de inducción (autoinducción e inducción mutua) y, a modo de ejemplo, se calculan el coeficiente de autoinducción de un solenoide y el coeficiente de inducción mutua de dos solenoides. Después se calcula la energía

asociada al campo magnético almacenada en una bobina para obtener a continuación la densidad de energía del campo magnético y la del campo electromagnético en general. Seguidamente se analizan los circuitos RLC, poniendo de manifiesto la equivalencia de su ecuación fundamental y la del oscilador armónico forzado y con amortiguamiento. En el siguiente apartado se introduce la corrección llevada a cabo por Maxwell a la ley de Ampère para hacerla compatible con la ley de conservación de la carga en el caso no estacionario. Finalmente se presentan las cuatro ecuaciones de Maxwell, que constituyen las leyes fundamentales del electromagnetismo.

- 18. Ondas electromagnéticas. Comienza el capítulo obteniendo la ecuación de ondas en el vacío, para el campo eléctrico y para el campo magnético. En primer lugar se estudian las ondas planas, poniendo de manifiesto el carácter transversal de las mismas, se establece la relación entre los campos eléctrico y magnético y se definen los estados de polarización. Se pone de manifiesto el hecho de que las ondas electromagnéticas transportan momento lineal y energía y se define el vector de Poynting. A continuación se describen algunas fuentes de ondas electromagnéticas: dipolo eléctrico o magnético oscilante, carga acelerada, etc... Se realiza también un breve análisis de la propagación de las ondas en la materia, relacionando la velocidad de propagación con la permitividad y permeabilidad del medio, y se define el índice de refracción. Finalmente se describe el espectro electromagnético.
- 19. Óptica. Para terminar el bloque temático dedicado al electromagnetismo se estudia la luz, haciendo hincapié en que la Óptica es el estudio de los fenómenos asociados a una parte del espectro electromagnético descrito en el tema anterior. En la primera parte del capítulo se enuncia el principio de Huygens y se obtienen las leyes de reflexión y refracción de la luz en una superficie plana que separa dos medios con índice de refracción diferente. Seguidamente se pone de manifiesto la dependencia del índice de refracción con la longitud de onda mediante el ejemplo de la dispersión en un prisma. La segunda parte del tema está dedicada a la Óptica Geométrica. Despues de establecer los límites de validez de la aproximación que supone representar la propagación de las ondas mediante rayos, se introduce el concepto de camino óptico y se presenta el principio de Fermat. A continuación comienza el estudio de los sistemas ópticos: espejos, lentes, combinaciones de lentes, y sus aplicaciones más inmediatas: Lupa, cámara fotográfica, microscopio y el telescopio. Mediante algunos ejemplos sencillos se calcula la posición de la imagen a través de los sistemas ópticos anteriores, su aumento lateral y sus caractersticas.

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

2.6.2. Programa de prácticas: Técnicas Experimentales I

Introducción

Como ya se ha señalado anteriormente, el trabajo de laboratorio es fundamental en el proceso de formación de un Graduado en Física o Graduado en Ingeniería Electrónica. Es por ello que, aunque la asignatura *Técnicas Experimentales I* no constituye el objeto de este Proyecto Docente, incluyo aquí los contenidos del programa de prácticas como parte complementaria de la asignatura *Física General*.

El trabajo de laboratorio implica una participación directa del alumno en el proceso de aprendizaje y cubre dos aspectos esenciales: en primer lugar, la aplicación de los diferentes conceptos aprendidos en el curso teórico, facilitando una mejor comprensión de los mismos y, por otro lado, el desarrollo de habilidades necesarias para la labor experimental, adquiriendo experiencia en el manejo de instrumentos de medida.

El programa de *Técnicas Experimentales I* (6.0 ECTS) está formado por una introducción teórico-práctica impartida en el aula y por 10 prácticas de laboratorio que se realizarán en el laboratorio en sesiones de cuatro horas de duración. Además, se pueden incluir algunas clases de laboratorio adicionales para la repetición de prácticas y corrección de los informes.

Asimismo, se hace entrega a los alumnos de un cuaderno de prácticas en el que se explica la forma de realizar cada una de ellas y se incluye además una serie de normas para la entrega de los informes de las prácticas.

Programa

I. Introducción (0.7 ECTS)

- 1. Cálculo de errores y tratamiento de datos
- 2. Manejo de programas de gráficos y tratamiento de datos
- 3. Presentación de informes

II. Instrumentos de medida

(0.3 ECTS)

- 1. Nonius y micrómetro
- 2. Fuentes de alimentación
- 3. Osciloscopio

- 4. Multímetro
- 5. Componentes eléctricos

III. Complementos teóricos preparatorios

(1.0 ECTS)

1. Teoría de circuitos

IV. Prácticas de Mecánica, Electromagnetismo y Óptica

(4.0 ECTS)

1. El péndulo físico. Medida de g.

Se investiga la relación entre el período de oscilación de una varilla delgada y la distancia del eje de oscilación al centro de gravedad de la misma. Con estos datos se calcula el valor de la aceleración de la gravedad.

2. Movimiento armónico simple. Ley de Hooke.

Se analiza experimentalmente el movimiento periódico de una masa suspendida de un muelle. Se determina la dependencia entre el período de oscilación y la masa suspendida, y se obtiene el valor de la constante elástica del muelle. Este resultado se compara con el valor deducido de la ley de Hooke, midiendo el alargamiento del muelle en función de la masa colocada.

3. Plano inclinado: oscilaciones. Muelles en serie y en paralelo.

En primer lugar se determina la constante elástica de un muelle. Posteriormente se estudia el acoplamiento de las constantes elásticas de dos muelles según estén dispuestos en serie o en paralelo. Finalmente se mide la aceleración de la gravedad utilizando un dispositivo experimental basado en el deslizamiento de un cuerpo en un plano inclinado.

4. Momento de inercia

Se analiza el movimiento de un disco acoplado a un tambor que gira por el par ejercido por una masa suspendida de una cuerda enrollada en el mismo. Midiendo el tiempo de caída de la masa y su aceleración se determina el momento de inercia del disco.

5. Medida de la velocidad del sonido. Tubo de resonancia.

Utilizando el fenómeno de resonancia de las ondas sonoras en un tubo de longitud variable, se determina experimentalmente la velocidad del sonido en el aire a temperatura ambiente.

6. Corriente continua I. Resistencia interna de una fuente.

Se aprende a manejar el multímetro y se verifican la ley de Ohm y las leyes de

Kirchoff para circuitos de corriente continua. Se miden las resistencias conectadas en distintas configuraciones y se estima la resistencia interna y la fuerza electromotriz de una fuente.

7. Corriente continua II. Curva característica de una lámpara.

Se discuten situaciones en las que la inserción de instrumentos de medida en circuitos de corriente continua altera las características del circuito. A continuación se mide la curva característica de una lámpara.

8. Instrumentos de medida. Descarga de un condensador.

Se profundiza en el manejo del multímetro y de las fuentes de alimentación realizando medidas de la descarga de un condensador. Se estudian las características de los circuitos con condensadores y las soluciones de las ecuaciones diferenciales simples.

9. Corriente alterna. Circuito RLC. Manejo del osciloscopio.

Se estudia la corriente alterna en circuitos con resistencias, condensadores y bobinas. Se determina experimentalmente el desfase entre la intensidad de corriente y la fuerza electromotriz en un circuito RLC, así como la caída de potencial en cada uno de sus componentes. Todas estas medidas se realizan utilizando el osciloscopio como instrumento de visualización y medida de señales. Asimismo, se estudia el fenómeno de la resonancia en circuitos RLC.

10. Corriente inducida en un solenoide. El transformador.

Se observan los fenómenos de inducción electromagnética entre imanes y circuitos. En particular se estudia el transformador y se comprueba la ley de Lenz.

2.7. Bibliografía

La bibliografía de Física General es muy extensa y el contenido de casi todos los libros es bastante similar. Por otra parte, es difícil encontrar un único texto que se adapte perfectamente a los propósitos del profesor, aunque cualquier texto es mejor para el alumno que los apuntes tomados en las clases. Un aspecto importante es la escasez de libros de texto en lengua vasca. Este hecho implica que los alumnos deben realizar un esfuerzo adicional para adaptarse a la terminología en otras lenguas lo que, por otra parte, es enriquecedor para el alumno.

La bibliografía presentada contiene un número suficiente de libros para que los alumnos tengan la posibilidad de elegir uno o varios libros de acuerdo con sus gustos, pero el número de libros propuestos tampoco es excesivo para no desanimarlos ni desorientarlos. La primera parte de esta sección incluye libros para desarrollar el contenido teórico de la asignatura, junto con un breve comentario sobre cada uno de ellos. Seguidamente se da una breve bibliografía de profundización para aquellos alumnos que deseen ampliar su conocimiento a un nivel superior del impartido en clase. A continuación se propone un pequeño conjunto de libros de problemas. Hay que tener en cuenta que los libros de contenido teórico poseen todos ellos colecciones de problemas del nivel adecuado; sin embargo, los alumnos pueden echar de menos el comprobar cómo se resuelve alguno de los ejercicios que intentan solucionar. Es importante recomendar al alumno que utilice de forma adecuada los libros de problemas y no se limite a estudiar la forma en que se resuelven los ejercicios, sino que solamente recurra a la solución una vez que lo haya resuelto él mismo o haya reflexionado un tiempo suficiente sobre el problema.

Finalmente se incluyen varias direcciones de Internet donde pueden encontrarse artículos divulgativos y materiales de interés.

2.7.1. Libros de teoría recomendados a los estudiantes

■ TIPLER P. A., MOSCA G., *Física para la ciencia y la tecnología 6^a Ed.*, Editorial Reverté, Barcelona, 2010.

Es muy apropiado para desarrollar el programa presentado. Su diseño es muy agradable e incluye una gran variedad de esquemas, ejemplos resueltos, cuestiones y problemas. Los desarrollos matemáticos son tratados de forma sencilla, pero es muy rico en conceptos y elegante en los razonamientos. Posee además material adicional muy útil para el profesor. Las dos últimas ediciones en castellano, en 6 tomos, son

muy prácticas.

■ FISHBANE, P. M., GASIOROWICZ, S., THORNTON, S. T., *Physics for Scientists and Engineers*, *3*^a *Ed.*, Addison-Wesley, 2003.

Al igual que el anterior es muy apropiado para desarrollar el programa propuesto. Se recomienda la edición en inglés ya que la traducción al español es bastante pobre y no está muy cuidada.

■ FISHBANE, P. M., GASIOROWICZ, S., THORNTON, S. T., Fisika zientzialari eta ingeniarientzat. Servicio editorial de la UPV/EHU, 2008.

Es la traducción al Euskera de la 2^a edición en inglés. Se publicó en 2008 y es el segundo libro publicado de Física General a nivel universitario en lengua vasca.

■ YOUNG H. D., FREEDMAN R. A., *Sears Zemansky Física Universitaria*, 12^a Ed., Addison-Wesley, 2009.

Se trata de un texto clásico de Física General que se ha modernizado al estilo de las anteriores referencias y ha mejorado mucho desde el punto de vista pedagógico. Las explicaciones son claras, con numerosos ejemplos y contiene una gran variedad de ejercicios muy interesantes y adecuados para el nivel del curso que se propone.

■ AGIRREGABIRIA J.M., DUOANDIKOETXEA A., ENSUNZA M., ETXEBARRIA J.R., EZENARRO O., PITARKE J.M., TRANCHO A. Y UGALDE P., *Fisika Orokorra 2^a Ed.* UEU, Bilbao, 2003.

Es un libro basado en las clases de Física impartidas en la Facultad de Ciencias y su contenido ha sido elaborado a partir de libros de texto clásicos. De entre todos los libros propuestos es el único que trata con rigor el tema del movimiento relativo tal y como se presenta en este proyecto docente. Está disponible en internet para su uso libre en www.buruxkak.org

2.7.2. Bibliografía de profundización

■ FEYNMAN R. P., LEIGHTON R. B. y SANDS M. L., *The Feynman Lectures on Physics*, Pearson-Addison-Wesley Iberoamericana 2006.

Sus tres volúmenes están basados en las clases impartidas por R. P. Feynman en Caltech en el periodo 1961-1963. Tienen un enfoque totalmente distinto a los libros actuales de Física universitaria. Está estructurado en capítulos cortos que pueden

resultar de lectura interesante para aquellos estudiantes más avanzados y motivados. Muchos de los temas tratados no son objeto del programa de esta asignatura y se estudiarán en asignaturas de cursos superiores.

■ ALONSO M. y FINN E. J., *Física*, Addison-Wesley 1995

Se trata de un esfuerzo de síntesis y de puesta al día de la edición en 3 volúmenes publicada en 1976. Aquella edición era más formal desde el punto de vista matemático pero pedagógicamente no era tan útil. La edición resumida de 1995 cuida más el aspecto pedagógico.

2.7.3. Libros de problemas

 HERNÁNDEZ J., TOVAR J., Problemas de Física: mecánica, Universidad de Jaén, 2009.

Libro elaborado a partir de problemas propuestos en exámenes y resueltos en clase durante los últimos años en la Escuela Politécnica Superior de la Universidad de Jaén por los responsables de la asignatura en dicha escuela. Proporciona a los alumnos un texto de referencia para establecer estrategias adecuadas en la resolución de problemas. Los problemas resueltos están comentados y contienen una gran cantidad de figuras y diagramas. Trata todos los temas de mecánica salvo la dinámica de fluidos.

■ BURBANO DE ERCILLA S., BURBANO GARCÍA E., *Problemas de Física*, 32^a Ed., Editorial Tébar, Madrid 2006.

Se trata de un libro muy clásico en la bibliografía de Física General de primer curso universitario. Contiene ejercicios a todos los niveles, desde bachillerato hasta nivel universitario. Es recomendable que los estudiantes lo utilicen con precaución, y no debe utilizarse como una lectura. Al contrario, se animará a los estudiantes a realizar los ejercicios con su propia estrategia y utilizar el resultado del libro solo para comprobar que han llegado a la solución correcta.

ENSUNZA M., ETXEBARRIA J.R., EZENARRO O., PITARKE J.M., UGALDE
 P. Y ZABALA N., Fisika Orokorra, Ariketak, UEU, Iruñea 1989.

Es un libro más modesto que los anteriores. Sin embargo tiene un nivel adecuado para el programa que presento. Además de contener problemas resueltos con expli-

caciones claras ayudadas de diagramas y figuras, propone una serie de problemas al final de cada tema e indica la solución a la que debe llegar el estudiante.

■ HALPERN, A., 3000 Solved Problems in Physics. Schaum's Solved Problems Series, Mc Graw Hill.

Se trata de una edición moderna y actualizada de uno de los libros clásicos de problemas resueltos de la serie Schaum. Es muy completo. Contiene problemas de todos los temas propuestos en este proyecto docente además de temas de Física General que por limitaciones de tiempo no están incluidos en el programa y que se verán en cursos superiores. Los problemas están resueltos apoyados por explicaciones claras y muchos diagramas de gran utilidad para el alumno. Así mismo, y pese a ser un libro estadounidense, todas las unidades utilizadas son del sistema internacional.

2.7.4. Revistas y direcciones de internet

- La revista American Journal of Physics, editada por "American Association of Physics Teachers" presenta a menudo artículos de diferente dificultad destinados a profesores y estudiantes de Física: http://scitation.aip.org/ajp/
- La Real Sociedad Española de Física (RSEF) en su página WEB, zona de "links" da acceso a su revista, en la cual a menudo aparecen artículos divulgativos: http://rsef.org
- "Open Courseware" del Massachusetts Institute of Technology alberga materiales útiles de sus cursos de Física. http://ocw.mit.edu/courses/physics/
- Curso interactivo de Física en Internet de Angel Franco, del Departamento de Física Aplicada I de la UPV/EHU. http://www.sc.ehu.es/sbweb/fisica/
- Repositorio de material educativo del consorcio "Conceptual Learning of Science": http://www.colos.org/
- Repositorio de materiales de Open Source Physics. http://www.compadre.org/osp/
- The Python tutorial: http://docs.python.org/py3k/tutorial/index.html

3 Modificaciones introducidas por el EEES respecto a los planes anteriores

La enseñanza de materias de carácter científico y en particular la Física, por sus propias características, no se reduce a una mera transmisión de conocimientos. El estudiante parte de hipótesis iniciales, aplica leyes y principios para resolver problemas nuevos que deberá analizar para ver si están de acuerdo con la experiencia. Así se fomenta el análisis crítico y la capacidad de observación.

Por eso en nuestro caso, los cambios que se han producido con la implantación del "Plan Bolonia" afectan más a la **forma** que al **fondo**, puesto que ya enseñabamos a los alumnos *a aprender*, y ya fomentabamos en el alumnado el *ser capaz de hacer* o *saber hacer* en vez de sólo *hacer*.

He considerado que puede ser de interés hacer un breve resumen de las modificaciones que introduce la filosofía del "Plan Bolonia", basado en mi propia experiencia y en la compartida, dado que ya hace más de un curso que está implantado en la Facultad de Ciencia y Tecnología de la UPV/EHU.

a) Modificaciones de fondo:

- De una docencia basada en la enseñanza a una docencia basada en el aprendizaje.
- Profundo cambio de mentalidad en los sujetos del proceso.
- Potenciación de la autonomía de los alumnos.
- Redefinición de conceptos: Créditos
 - Movilidad
 - Objetivos/Competencias
- Acuñación de nuevos conceptos: Tarea
 - Carga de trabajo
 - Indicador
- Ampliación de criterios: Formación continua
 - Educación social
 - Valoración de actitudes

Conocimientos: Los basados en la enseñanza caducan y los basados en el aprendizaje no caducan.

- Objetivos \neq competencias: De conocimiento (valorados desde siempre)
 - Aptitudinales (valorados a veces)
 - Actitudinales (valorados sólo desde ahora)
- Profesor: de actor principal y transmisor de conocimientos a asesor, observador, guía, etc.
- Estudiantes: de receptores de concimiento a sujetos activos implicados en el proceso de enseñanza.
- b) Todas estas innovaciónes de "fondo" se corresponden con otras muchas innovaciones de "forma" que influirán directamente en la manera de concebir la docencia y por tanto impartirla y evaluarla.

En cuanto a la metodología los cambios fundamentales son:

- Disminución del número de alumnos para cada tipo de clase
- Reducción de las tareas presenciales y potenciación de las semipresenciales y a distancia.
- Se mantienen: Las clases teóricas (máximo 60 %).
 - Las de problemas con el nombre de Prácticas de Aula (PA).
 - Las tutorías adquieren mayor relevancia
- Se incorporan los seminarios.
- Se predetermina el momento y el tiempo de realización de las clases teóricas, PA y seminarios. Horarios menos flexibles.
- Necesidad de coordinación de los contenidos impartidos en los distintos tipos de clase. Mayor inversión de tiempo.
- Nuevo enfoque de actividades educativas. Renovación de los materiales de enseñanza.

Todo esto se refleja en cambios en el sistema de evaluación:

- Se transforma de final a continua.
- Se convierte en instrumento que genera expectativas positivas a los alumnos y que proporciona información:
 - al alumno de lo que debe mejorar

- al profesor sobre los cambios a introducir para mejorar los métodos
- No sólo se valoran conceptos y aptitudes sino tambien actitudes.

■ Frente al examen final de tipo clásico, evaluación continua mediante distintos indicadores e instrumentos de evaluación.

4 Mi experiencia con la docencia adaptada al EEES

En este apartado me propongo hacer una reflexión crítica basada en mi propia experiencia, valorando las ventajas y deventajas del nuevo plan, siempre bajo el punto de vista restrictivo que implica no abordar la innovación en su conjunto, sino sólo de una manera parcial en lo referente a metodología y evaluación.

4.1. Cursos piloto en la Licenciatura en Química: 2007-2010

Durante los cursos académicos 2007/2008, 2008/2009 y 2009/2010 participé en el Programa de Impulso para la Innovación Docente (IBP) de la UPV/EHU para la implantación del sistema de crédito europeo (ECTS), como miembro del equipo docente encargado de experimentar la nueva metodología en un grupo piloto correspondiente al primer curso de la Licenciatura en Química.

La asignatura *Física I* para la Licenciatura en Química era anual y tenía asignados 9 ECTS, lo que, para un alumno suponía 3 clases presenciales por semana, durante 2 cuatrimestres de 15 semanas cada uno. De estas clases, dos eran de teoría y una de prácticas de aula (PA). Debido al número de estudiantes matriculados en el curso (entre 50 y 60), las PA se desdoblaron en dos grupos, PA1 y PA2. Todas las clases, tanto las teóricas como las dos PA estaban a mi cargo.

La Guía Docente de la Facultad de Ciencia y Tecnología de la UPV/EHU, para el curso académico 2007/2008, 2008/2009 y 2009/2010, establecía las competencias, metodología y método de evaluación de la *Física I* del primer curso de Licenciatura en Química basado en las directrices del "Plan Bolonia". Los contenidos del programa no se modificaron respecto a los del plan anterior, vigente desde 2000/2001. De acuerdo con dicha Guía Docente la **evaluación** se llevó a cabo siguiendo los siguientes criterios:

1. Asistencia, participación y respuestas dadas a las preguntas formuladas en las clases

teóricas: 5 %.

2. Participación, trabajo, éxito en la resolución de ejercicios y métodos empleados en las PA: 25 %.

3. Examen escrito: Resolución de problemas, contestación a preguntas y cuestiones teóricas: 70 %.

Puesto que el número de estudiantes asignado a cada grupo de PA seguía siendo muy elevado, no era posible hacer una evaluación continua personalizada según el criterio 2. Por este motivo, para complementar la evaluación del trabajo realizado en clase por el alumnado, introduje una tarea extra: la entrega semanal de una selección de problemas que corregía y evaluaba. Además, les hacía una prueba escrita (control), hacia la mitad de cada cuatrimestre, cuya finalidad no era otra que "obligar" a los estudiantes a llevar la materia al día. Este control no era obligatorio y, como incentivo, aquellos que lo superaban obtenían 0.5 puntos extra en la nota final del cuatrimestre. Los que no lo superaban no eran penalizados.

Un problema recurrente que detecté en la enseñanza de la Física en la Licenciatura en Química era la gran heterogeneidad de los estudiantes que llegaban al primer curso de la Facultad. En efecto, la mayor parte de ellos, sorprendentemente, no habían cursado la Física de 2° de Bachiller ya que la normativa vigente se lo permitía. En general "rehuían" la Física. Por otra parte, los estudiantes procedían de diferentes centros de Enseñanza Media, con lo que llegan a la Facultad con bases muy dispares de Física y de Matemáticas. A esto hay que añadir la falta de interés de una parte importante del alumnado que no era consciente de que la Física y la Química son disciplinas estrechamente unidas, y contemplaban la Física tan sólo como un "obstáculo" que debían superar en los dos primeros cursos de licenciatura.

Esta situación ha dado lugar a que, en alguna ocasión, se haya llegado a sugerir "rebajar" el nivel de exigencia de la "Física para químicos" respecto a la "Física para físicos".

La solución a este problema debería abordarse desde la Administración, mediante una normativa que obligue a cursar en 2° de Bachiller una Física con unos contenidos mínimos obligatorios para que los estudiantes de química y de otras carreras científicotécnicas lleguen a la Universidad con unos conocimientos básicos adecuados.

En cuanto al **alumnado**, salvo excepciones, no percibí un cambio de actitud que implicara su participación activa en las clases, aunque, sólo a base de insistir, constaté un cierto cambio en algunos de ellos a medida que transcurría el curso. En general existía

una correlación entre los estudiantes que no superaban el curso y los que tomaban una actitud completamente pasiva en clase, limitándose en el mejor de los casos a copiar lo que se escribía en la pizarra. Estos son los que no han entendido que deben "aprender a aprender" y que para ello deben actuar con iniciativa propia y cierta autonomía para poder resolver un problema.

Es indudable que el sistema ECTS aumenta la carga docente del **profesor** que debe atender varios grupos de PA y preparar con exacta minuciosidad los contenidos a impartir en cada grupo para que ningúno de ellos quede desfasado. Sin embargo, según mi experiencia, los grupos de PA de 20-30 alumnos siguen siendo demasiado numerosos para poder hacer un seguimiento personalizado a todos. Además debido a la extensión del programa y que gran parte de los estudiantes no habían preparado previamente los problemas con los que se iba a trabajar en clase, era el profesor el que, al final, tenía que acabar resolviendo los ejercicios en la pizarra intentando la colaboración de los pocos estudiantes activos de la clase. Por otra parte, al ser el mismo profesor el responsable de los distintos subgrupos (PA1 y PA2), procedentes del desdoble, y dado que cada grupo debe recibir la clase a distinta hora, las PA se convierten en puras repeticiones, lo que resulta bastante frustrante para el profesor. Un problema adicional es el posible desfase entre los grupos cuando por necesidad de ajuste de horario no se puede impartir la correspondiente sesión de PA en el mismo día a ambos grupos. Lo ideal es que se impartan el mismo día, de forma que un día festivo no desequilibre la docencia de las PA.

En cuanto a los **ejercicios** que cada alumno debía entregar semanalmente se daba una cuestión de complicada solución para el profesor: Se trataba de evaluar de forma continua el trabajo que realizaban los estudiantes utilizando como criterio los problemas entregados. Sin embargo muchos se copiaban los problemas entre ellos, unas veces bien y otras veces mal. Al cabo de varias semanas de corregir estos ejercicios, no era difícil saber quién los habia trabajado y quién los había copiado 10 minutos antes de la entrega. La cuestión es: ¿quién debe llevar mejor nota, el estudiante que ha entregado el ejercicio correcto y que sin duda lo ha copiado, o aquel que el profesor sabe a ciencia cierta que lo ha trabajado y sin embargo ha cometido algún pequeño error? Los criterios de evaluación deberían ser objetivos y sin embargo uno puede estar tentado en este caso a usar la subjetividad. Además son pocos los que modifican sus métodos de resolución siguiendo las indicaciones que el profesor hace en la corrección. Esto vuelve a ser causa de frustración para el profesor porque después de pasar muchas horas corrigiendo ejercicios que algunos estudiantes se han copiado entre sí, queda claro que no alcanzan el objetivo para el que estaban diseñados, a saber, servir de retroalimentación y suministrar información tanto al

estudiante como al profesor. Una solución hubiera sido que realizaran los ejercicios durante la sesión semanal de PA y los entregaran al final de la misma. Sin embargo esto no era factible por la necesidad de cubrir un amplio temario en un tiempo limitado. Además se corría el riesgo de que la entrega de ejercicios se conviertiera en un "examen" más ó que el alumnado dejara de asistir a las PA por temor a esta entrega.

En este curso piloto las **tutorías** no fueron de asistencia obligatoria, aunque se insistió en la conveniencia de su utilización regular. Desafortunadamente, salvo contadas excepciones, los estudiantes sólo las utilizaron la víspera de entrega de ejercicios, examenes o controles, lo que demuestra que no se mentalizaron de la importancia de llevar la asignatura al día, ni fueron conscientes de las ventajas que les suponía disponer de un apoyo de estas características.

Por lo que se refiere a la **evaluación final**, según los criterios de evalución establecidos, se podía dar el caso paradójico de que, alumnos con una puntuación de 3.0 (en una escala de 0 a 10) en el examen escrito, podían aprobar con un 5 de calificación final. Mi experiencia demostró que este caso se daba con cierta frecuencia, especialmente entre aquellos estudiantes cuyas tareas semanales mostraban claros indicios de haber sido copiadas, y en la valoración global de la prueba escrita se demostraba fácilmente que no habían adquirido las capacidades y destrezas necesarias para superar la asignatura. Esta situación paradójica era consecuencia de la aplicación de los nuevos criterios de evaluación, anteriormente mencionados, que asignan a la prueba escrita el 70 %, a las "tareas de clase" el 25 % y a la "participación" el 5 %. Para evitar esta situación se estimó conveniente establecer en la prueba escrita una nota mínima "de corte" no inferior a 4,0. Los estudiantes con una calificación igual o superior a ésta en la prueba escrita, se beneficiaban por este sistema de evaluación ya que el 30 % restante les eleva la nota final hasta el aprobado. Aquellos que habían obtenido una buena nota en el examen, generalmente también la tenían en el resto de las tareas y por lo tanto su calificación final nunca se veía perjudicada.

4.2. Primer año de la implantación del "Plan Bolonia" en el Grado de Física, Grado de Matemáticas y Grado de Ingeniería Electrónica: 2010-2011

Durante el curso acedémico 2010/2011 se implantaron en la Facultad de Ciencia y Tecnología 9 nuevos grados. Tres de ellos, el Grado en Física, el Grado en Matématicas y

el Grado en Ingeniería Electrónica comparten la asignatura *Física General* de 12 créditos ECTS repartidos en 2 cuatrimestres de 15 semanas cada uno. La matrícula superó con creces a las previsiones realizadas por la UPV/EHU y en el grupo que se me asignó me encontré con más 140 alumnos, lo que me obligó a impartir mi docencia en el Paraninfo de la facultad durante 2 meses con la consiguiente incomodidad de no disponer de una pizarra que todos los alumnos puedieran ver. Así, esos dos meses se convirtieron en un marathon de preparación de material en formato electrónico para las clases magistrales. Las clases de problemas (PA) las resolvimos utilizando un retroproyector con una cámara CCD que proyectaba a la pantalla del paraninfo lo que se escribía sobre un papel en blanco.

Evidentemente, en estas circunstancias se descartó totalmente el seguimiento individualizado de cada alumno según la filosofía del EEES. Tras dos meses, el grupo de 140 alumnos se dividió en dos grupos con horarios distintos: un grupo con los alumnos matriculados en el Grado en Matemáticas (57) y otro grupo con los alumnos del Grado en Física y del Grado en Ingeniería Electrónica (83). Ambos grupos estuvieron a mi cargo durante todo el primer cuatrimestre.

En general mi experiencia de los cursos piloto con los alumnos de la Licenciatura en Químicas me fué muy útil. Basado en mi experiencia anterior, decidí eliminar la entrega de problemas, porque se había demostrado que no era un instrumento útil para evaluar el trabajo realizado en clase, ya que no había dado el resultado que se esperaba y además con tantos alumnos era totalmente inviable para el profesor. Esta parte de la evaluación se sustituyó por auto-tests realizados vía *Moodle* que cada alumno realizaba al final de cada tema. Dado que esta era una tarea no presencial y podían discutir sus resultados tanto con sus compañeros como con el profesor antes de entregarla (y de hecho se les animaba a hacerlo) se redujo su valor en la evaluación final al 15 % y se aumentó la de los controles (del 5 % al 15 %) que pasaron a ser de carácter obligatorio. Así la evaluación se realizó tal y como se ha propuesto en este proyecto docente (ver apartado 2.5).

En lo que se refiere al **alumnado**, pienso que los estudiantes tenían ya más interiorizado la necesidad de trabajar todos los días, que cuando impartía la docencia en el curso piloto. Quizás el hecho de que todos los estudiantes de primer curso estuvieran utilizando la misma metodología y no ser un grupo reducido al que se le "exigía" trabajar de un modo continuo mientras a los demás se les aplicaba el método tradicional, influyera en este cambio de actitud.

En cuanto a las **tutorías** mi experiencia ha sido similar a la que tuve en el curso piloto de la Licenciatura en Químicas.

En general, y teniendo en cuenta todas las dificultades que se presentan durante una transición tras un cambio tan drástico como el que supone la implantación de los nuevos grados, la experiencia ha sido positiva. Sin embargo exige, sin duda alguna, mucho más esfuerzo, planificación y coordinación por parte del profesor.

4.3. En la Universidad de Cambridge: 2004-2006

Durante mi estancia postdoctoral en la Universidad de Cambridge, tuve la oportunidad de conocer su sistema universitario de "supervisions" y participar en él como supervisora de la asignatura "Physics IA" en el Robinson College. La filosofía no es muy distinta a la del "Plan Bolonia", sin embargo, es extraordinariamente eficiente. Los estudiantes, al igual que en la Facultad de Ciencia y Tecnología, eligen entre las asignaturas comunes aquellas que son obligatorias del grado que desean cursar. En el caso de Física asisten a 3 horas de clases magistrales y a una "supervision" por semana. Una "supervision" es similar a una tutoría en la que los alumnos, en grupos de dos o tres, discuten los problemas que se les han asignado en clase con un "supervisor". El día anterior a la "supervision" le entregan los ejercicios resueltos para que éste los corrija. Así parte de la "supervision" se convierte en una discusión tomando como base el trabajo realizado por el alumno durante la semana. La mayoría de los que desempeñan la labor de "supervisor" son doctorandos o investigadores postdoctorales, como fue mi caso, lo que supone una ventaja tanto para el "supervisor" como para el alumno, pues una mayor cercanía entre ambos supone una mayor confianza y por tanto mayor fluidez en el intercambio de conocimientos, lo que influirá, sin duda, muy positivamente en los resultados, que es lo que se pretende.

Este sistema permite hacer un seguimiento muy cercano de la evolución de los alumnos. La actitud de los alumnos es muy positiva ya que son plenamente conscientes del privilegio que tienen de participar de un sistema educativo de élite. Previamente tuvieron que pasar por procesos de selección muy duros para ser admitidos, y por ello hacen un gran esfuerzo por participar activamente en el proceso de aprendizaje incluso si las asignaturas no son las específicas de su grado. Por supuesto, no se plantean la inasistencia a clase o a una "supervision". La tasa de éxito es practicamente de un 100 %.

Quizás sin llegar al modelo de la Universidad de Cambridge, en el que las PA se hacen en grupos de dos alumnos, sería conveniente reducir en todo caso las PA a grupos de menos de 10 alumnos. Por supuesto, para ello hace falta una plantilla docente suficiente que pueda absorber tal encargo docente. Soy consciente de que en la situción actual y con las dotaciones económicas de la universidad española esto no deja de ser una utopía.

4.4. Conclusiones

En mi opinión el sistema adaptado al EEES podría ser muy provechoso para el estudiante, ya que está diseñado "a su medida".

Para ello, el alumnado deberá mentalizarse que debe cambiar su actitud pasiva por una actitud activa, para sacar el mayor provecho al proceso de enseñanza-aprendizaje. Han sido muchos años de enseñanza magistral y exámenes finales para que un cambio de mentalidad tan amplio como exige la aplicación del "Plan Bolonia" sea asimilado en poco tiempo por las actuales generaciones de estudiantes.

El día que los estudiantes sean conscientes de que:

- Estudiar en la Universidad es un privilegio y no una obligación.
- Tienen que "aprender" y no sólo "dejarse enseñar".
- No tener clase no significa "no tener que estudiar".
- Una clase bien aprovechada no equivale a "haberlo copiado todo".
- No todo lo que hay que saber está en los "apuntes".
- Hay muchas formas de estudiar sin tener un libro delante.
- Los conocimientos que no hayan adquirido por su cuenta, mediante todos los recursos a su alcance, no les servirán para resolver los problemas que se le plantearán en el futuro.

serán capaces de comprender que la innovación que supone la aplicación del "Plan Bolonia" les van a favorecer tanto más cuanto mayor sea su implicación en él.

Confío, porque así me gustaría que fuera, que esto pueda lograrse en el menor periodo de tiempo posible.

Parte III Proyecto investigador

1 Antecedentes: Actividad investigadora hasta la actualidad

Este capítulo es un resumen de la investigación que he realizado hasta el momento y que pretendo continuar en un futuro próximo. Para una descripción más detallada remito al lector a la bibliografía adjunta que contiene los artículos originales, y a las referencias contenidas en ellos.

1.1. Etapa predoctoral

La actividad investigadora desarrollada durante esta etapa consistió principalmente en el estudio teórico de diversos fenómenos físicos asociados a la presencia de excitaciones electrónicas y efectos de muchos cuerpos en sólidos. En particular investigué sobre la respuesta dinámica en sólidos reales (metales nobles, metales de transición y sus óxidos), vidas medias de electrones "calientes" en metales nobles y poder de frenado.

1.1.1. Funciones de respuesta en sólidos reales

Las interacciones electrónicas juegan un papel importante en la determinación de las propiedades de los materiales. Las correlaciones electrónicas de corto y largo alcance han sido el tema de diversas investigaciones teóricas recientes y sin embargo todavía no se conoce con exactitud sus efectos y su relación con la estructura de bandas de los sólidos. El análisis de medidas experimentales obtenidas en instalaciones con fuentes de rayos-X de tercera generación, utilizando cálculos *ab initio* de respuesta electrónica en el marco de la teoría del funcional de la densidad dependiente del tiempo (*time-dependent density-functional theory*, TDDFT) para cristales periódicos, ha demostrado que se puede obtener información detallada del sólido estudiando sus excitaciones electrónicas.

Metales nobles

Los primeros cálculos que realicé fueron sobre la respuesta dinámica del oro, utilizando una base de ondas planas, pseudopotenciales y una descripción realista del sólido, incluyendo su estructura de bandas [1]. En el rango óptico los cálculos mostraron gran concordancia con los experimentos. A bajas energías muestra un plasmón amortiguado por las posibles transiciones interbanda, y a altas energías un doble pico, también observado en el cobre y en la plata, que parece ser común a los metales nobles, y que procede de una excitación colectiva de electrones d localizados hibridados con los electrones s deslocalizados.

Metales de transición 3d

En Enero de 2001 realicé una primera visita a la Universidad de Tenessee en Knox-ville (UTK) y al Oak Ridge National Laboratory (ORNL) con el propósito de realizar cálculos de función de respuesta en Cu utilizando ondas planas aumentadas linealmente (LAPW). Esta visita me brindó la oportunidad de contactar con el grupo experimental liderado por el Prof. B. C. Larson, que realizaba, entre otros, experimentos de scattering inelástico de rayos-X (IXS) en el Argonne National Laboratory (ANL). Me propusieron realizar unos primeros cálculos de Sc y Cr, ya que disponían de muestras de alta calidad de estos metales. Sus medidas de IXS podían relacionarse directamente con mis cálculos de función de respuesta en el marco de la teoría del funcional de la densidad dependiente del tiempo a través del factor de estructura dinámico en función del vector de onda y la frecuencia, y pareció un camino prometedor para intentar comprender las correlaciones electrónicas [2].

Para comparar las medidas experimentales con los cálculos teóricos fue preciso escalar las medidas experimentales a unidades absolutas sin ningún parámetro ajustable. Para ello desarrollamos un procedimiento simple, pero no utilizado hasta entonces, que consistió en realizar una medida absoluta sobre una muestra de Al con la misma geometría que se iba a utilizar después con las demás muestras. El espectro obtenido se normalizó con el cálculo teórico utilizando la regla de la suma que debe cumplir el factor de estructura dinámico [3].

Los metales de transición se caracterizan por tener sus estados d parcialmente ocupados y muy localizados, lo que se traduce en bandas planas por encima y por debajo del nivel de Fermi. Los cálculos se realizaron utilizando una base LAPW para el cálculo del estado fundamental con la aproximación local de la densidad (*local density aproxi-* mation, LDA). Para la función de respuesta utilizamos tanto la aproximación de las fases aleatorias (*random phase approximation, RPA*), como la aproximación adiabática de la densidad local (*adiabatic local-density approximation*, ALDA). Así mismo, se incluyeron los efectos de la red periódica a través de los efectos de campo local cristalino (*crystal local field effects*, CLFE).

Estudiamos el Sc y el Ti, los primeros metales de transición de la serie 3d, ambos hexagonales compactos [4]. Para valores bajos vectores de onda se investigaron las excitaciones plasmónicas y se encontró que los CLFE no son despreciables incluso en el límite de grandes longitudes de onda. La dependencia de la energía del plasmón con la dirección del vector de onda también resultó notable. Para valores altos del vector de onda se compararon nuestros cálculos con medidas de IXS [5]. Por debajo del borde-M (excitaciones $3p \rightarrow 3d$) la concordancia fué excelente cuando en los cálculos se incluyeron los CLFE, incluso dentro de la RPA, lo que demuestra que la física fundamental de la dinámica electrónica se encuentra contenida en la RPA, incluso para los sistemas correlacionados como los metales de transición.

En el caso del Cr, que se encuentra en la mitad de la serie 3d, se encontró un pico a bajas energías originado por transiciones $d \to d$ entre estados cercanos al nivel de Fermi y mucho más intenso que el del Sc ya que la densidad de estados (density of states, DOS) de carácter d en el Cr es mayor por debajo del nivel de Fermi [5]. Para altas energías, al igual que en el caso del Sc, los CLFE tienen un efecto remarcable en el borde-M. En cualquier caso, la desviación entre teoría y cálculos es mayor en este rango de energía debido principalmente a la aproximación local de la densidad utilizada para el cálculo del estado fundamental.

Con el fin de investigar el papel que juegan los electrones d por encima y por debajo del nivel de Fermi en el espectro de excitación, se llevaron a cabo cálculos del factor de estructura dinámico para toda la serie de metales de transición con las bandas 3d parcialmente llenas. Para longitudes de onda largas los plasmones se amortiguaron a medida que las bandas d se llenaban, debido a transiciones $d \to p$. Para grandes vectores de onda se encontró una nueva estructura a bajas energías consecuencia de las transiciones $d \to d$ y que seguía la tendencia de la componente d de la DOS de los metales de esta serie [5].

Así, la observación a vectores de onda grandes de las transiciones $d \to d$, no visibles en el regimen óptico, sugiere que la técnica IXS puede ser una herramienta muy eficiente para el estudio de los materiales altamente correlacionados. Así mismo la comparación entre cálculos de TDDFT y medidas de IXS normalizadas en las mismas unidades ofrece muchas posibilidades para testear la exactitud de las distintas aproximaciones del ker-

nel de intercambio y correlación y para mostrar la interacción entre el intercambio y la correlación debido al efecto de muchos cuerpos y la red cristalina a través de los CLFE.

Oxido de titanio

La colaboración con el grupo experimental de ORNL se extendió para estudiar un nuevo sistema: El óxido de titanio, TiO₂. Las medidas mostraban, para grandes valores del momento transferido, un pico agudo que se identificó, sorprendentemente, con una excitación colectiva que sólo se manifestaba cuando los CLFE estaban incluidos en el cálculo [6]. La magnitud de este pico mostró una dependencia no monotónica en el vector de onda, pero siempre se encontró a la misma frecuencia para todos los valores vector de onda medidos y calculados. Así mismo se comprobó que esta excitación estaba presente hasta valores muy altos de vector de onda. Al igual que en el Sc y Cr, la concordancia entre teoría y experimento fue excelente. El mismo tipo de cálculo se repitió para el VO₂, con resultados muy similares. En general, los cálculos basados en la RPA mantenían todas las características de los espectros experimentales siempre y cuando la estructura de bandas y los CLFE fueran incluidos de forma apropiada.

1.1.2. Vidas medias de electrones calientes en metales nobles

Los electrones calientes son aquellos electrones excitados con energías de unos pocos eV por encima del nivel de Fermi. El conocimiento de la vida media de un electrón excitado es importante ya que, por ejemplo, la probabilidad de activar un proceso químico en una superficie es tanto mayor cuanto más tiempo pase un electrón en un estado excitado. El decaimiento de electrones excitados puede darse como resultado de distintos procesos elásticos o inelásticos como interacciones electrón-electrón, electrón-fonón o electrón-impureza. Para electrones con energías superiores a 0.5-1 eV por encima del nivel de Fermi las interacciones electrón-electrón son el principal mecanismo de decaimiento de los electrones, los cuales tienen una vida media del orden de femtosegundos.

Realizamos un estudio extensivo de la vida media de estos electrones en los metales nobles Cu, Ag y Au utilizando una base de ondas planas y pseudopotenciales [7, 8]. Lo novedoso del cálculo fué que se incluyeron, por primera vez en un cálculo con estructura de bandas, los efectos de intercambio y correlación en la interacción entre pares de electrones del mar de Fermi (apantallamiento de la interacción del electron excitado con los electrones del mar de Fermi), así como en la interacción entre el electron excitado y los electrones del mar de Fermi. En presencia de los electrones d, se demostró que ambas

correcciones tienen signos opuestos y practicamente se compensan. Domina ligeramente el impacto del agujero del intercambio y correlación en el electrón excitado dando lugar a vidas medias entre el 2 % y 3 % superiores.

También estudiamos el papel que las bandas d ocupadas juegan en la relajación de los electrones en los metales nobles. Se demostró que la desviación de la vida media de estos materiales con respecto al modelo del gas de electrones homogéneo con electrones de valencia sp, se debe principalmente a la participación de los electrones d en el apantallamiento de la interacción entre el electrón excitado y los demás electrones del sólido, independientemente de si los estados d ocupados pueden abrir (como en Cu y Au) o no (como en el caso de Ag) un canal de decaimiento vía creación de pares electron-hueco d-sp.

Los cálculos de Ag se compararon con medidas de fotoemisión de dos fotones resuelta en el tiempo, y para bajas energías mostraron concordancia con nuestros cálculos. Para energías más altas los cálculos quedaron ligeramente por encima del experimento.

1.1.3. Poder de frenado de sólidos reales

Como parte del estudio de la interacción de los sólidos con partículas cargadas realizamos cálculos de la pérdida de energía de iones moviéndose en sólidos reales mediante cálculos de primeros principios. En particular, se estudió el poder de frenado de los electrones de valencia del Al y el Si para protones y antiprotones. La densidad electrónica de los electrones de valencia de Al y Si es muy similar, r_s = 2.07 y r_s =2.01 respectivamente, y por lo tanto, dentro del modelo de electrones libres el poder de frenado de ambos coincide, en contraposición a lo que ocurre en los cálculos de primeros principios. Cuando la velocidad del proyectil es baja y solo los electrones de valencia participan en el frenado del ion, la pérdida de energía en Si es menor que en Al, de acuerdo con las medidas experimentales. El Al tiene un poder de frenado mayor que el del modelo de electrones libres, mientras el Si lo tiene menor debido a su gap de energía. A altas energías se puede demostrar analíticamente que el poder de frenado sólo depende de la densidad y es independiente de la estructura de bandas por lo que el resultado para ambos sólidos coincide con el del gas de electrones libres.

Este trabajo se publicó como parte de una revisión sobre varios aspectos de los efectos causados por los efectos no lineales, efectos de estructura de bandas y efectos de superficie sobre la interacción de partículas cargadas con sólidos [9].

1.2. Etapa postdoctoral

1.2.1. Cálculos de Monte Carlo cuántico

Durante mi estancia postdoctoral en el Cavendish Laboratory de la Universidad Cambridge realicé cálculos de Monte Carlo cuántico (*Quantum Monte Carlo*, QMC) variacionales (*Variational Quantum Monte Carlo*, VMC) y de difusión (*Diffusion Quantum Monte Carlo*, DMC) en moléculas con un doble propósito: Por un lado familiarizarme con la teoría y la técnica, por aquel entonces nueva para mí, y por otro lado probar el programa utilizado, para contribuir a su desarrollo.

En una primera etapa llevamos a cabo cálculos de la energía de disociación de los dimeros catiónicos radicales que comparten tres electrones en el enlace (He, NH₃, H₂O, HF, and Ne) [10]. Estos sistemas son particularmente difíciles para los métodos estándar de la teoría del funcional de la densidad (*density-functional theory*, DFT) como la LDA o la aproximación del gradiente generalizado (*generalized gradient approximation*, GGA) ya que no cancela la auto-interacción (*self-interaction*, SI) del electrón. Los métodos químico-cuánticos de alto nivel como el método de teoría de perturbaciones de orden 2 de Møller–Plesset (MP2) o métodos de cluster acoplados, (*coupled-cluster methods* CCSD(T)), pueden tratar la correlación de forma precisa, pero la precisión depende de la calidad de la base utilizada y escalan como N^5 o N^7 , siendo N el número de electrones en el sistema. QMC ofrece una alternativa prometedora de tratar la correlación electrónica ya que trata la correlación explícitamente y el cálculo de la energía escala aproximadamente como N^2 - N^3 .

Realizamos cálculos con la aproximación de Hartree-Fock, con DFT con varios funcionales de intercambio y correlación (LDA, GGA, B3LYP) y con QMC con y sin pseudopotenciales. Los cálculos de DMC se realizaron dentro de la aproximación del nodo fijo utilizando como función de prueba la stardard de Slater-Jastrow (SJ). Los resultados se compararon con cálculos existentes de CCSD(T) que se consideraban los más exactos hasta la fecha. De todos estos cálculos, los realizados con QMC (con y sin pseudopotencial) fueron los más exactos. Para el único valor experimental conocido, tambien fueron los cálculos de QMC los que coincidieron con el valor experimental.

En el caso del radical del dimero de H₂O, se estudió la estabilidad relativa de la estructura enlazada por hidrógeno frente a la enlazada a través del átomo pesado (*hemibonded*). De acuerdo con los métodos post-Hartree Fock la estructura favorecida fué la enlazada por H, aunque la diferencia entre ambas resultó ser mayor en los cálculos de DMC. Sin

embargo no existen resultados experimentales que puedan decidir qué cálculo es el más exacto.

Finalmente la excelente concordancia entre los resultados de DMC con y sin pseudopotenciales pusieron de manifiesto la buena calidad de los pseudopotenciales utilizados.

En una segunda etapa hice cálculos de disociación de un dímero de agua incorporando las correlaciones de *backflow* a la función de Slater-Jastrow (SJB) [11]. La incorporación de dichas correlaciones recuperó una cantidad significativa de la enegia de correlación, y se obtuvo una energía DMC extrapolada para paso de tiempo cero (*zero time-step*) de la molécula de H₂O tan solo 10 mhartree por encima del valor experimental.

Estudiando cuidadosamente los errores de paso de tiempo (*time-step errors*) se observó que éstos se cancelan cuando se realizan diferencias de energías, como es el caso del cálculo de las energías de disociación.

También realizamos cálculos con y sin pseudopotenciales y se compararon dos esquemas diferentes para tratarlos. Aunque las energías totales y los *time step errors* diferían en ambos tratamientos, se encontró que la diferencia era la misma en el monómero y en el dímero y por lo tanto se cancelaron al evaluar la energía de disociación. En cuanto a los resultados obtenidos con y sin pseudopotenciales y con las 2 funciones de prueba, SJ y SJB, todos estuvieron dentro de la barra de error experimental.

1.3. Tras la etapa postdoctoral

1.3.1. Poder de frenado en superficies

Este trabajo fue motivado parcialmente por experimentos relizados para estudiar la interacción de iones cargados con la superficie interna de microcapilares y nanocapilares, y cuya interpretación precisaba conocer el comportamiento asintótico de la pérdida de energía a grandes distancias de una superficie.

Llevamos a cabo cálculos de la pérdida de energía de una partícula moviendose cerca de una superficie de Mg utilizando una descripción realista de la misma, es decir, incluyendo su estructura de bandas completa y un tratamiento completo de la respuesta dinámica de los electrones de valencia [12]. Se encontró que la estructura de bandas, y en particular las transiciones interbanda, juegan un papel fundamental en la descripción asintótica del poder de frenado lejos de la superficie: La anchura de linea de la respuesta de la superficie aumenta para valores pequeños del momento transferido, lo que aumenta

la pérdida de energía de las partículas cargadas lejos de la superficie. Este efecto no puede describirse con modelos simplificados como los usados hasta ahora para investigar el poder de frenado en superficies.

1.3.2. Cálculos de Monte Carlo cuántico. Energía de interacción y factor de estructura

La DFT se ha aplicado con éxito en una gran cantidad de sistemas, utilizando siempre funcionales de intercambio y correlación obtenidos de parametrizaciones basadas en los cálculos de energía del gas de electrones homogéneo realizados por Ceperley y Alder en los años 80 mediante el método DMC del nodo liberado (*released-node DMC*). Este método tiene la limitación de que las fluctuaciones estadísticas crecen rápidamente y el ruido estadístico puede dominar la señal incluso antes de alcanzar el estado fundamental. Además el tamaño del sistema que se puede simular con este método es también limitado. Muchos cálculos han intentado mejorar los datos de Ceperley y Alder. Por ejemplo, y dentro de la aproximación del nodo fijo, se introdujeron las correcciones de *backflow* y las correlaciones de 3 cuerpos. Sin embargo se utilizaron cálculos de VMC (mucho menos costosos computacionalmente) para extrapolar al límite termodinámico los resultados de un cálculo de DMC para un sistema finito. Es decir, asumieron que la dependencia con el tamaño del sistema de los cálculos VMC y DMC era la misma.

En una primera etapa realizamos cálculos de DMC para un gas de electrones paramagnético con y sin las correcciones de backflow y utilizando un potencial de Coulomb periódico modelado (model periodic Coulomb potential, MPC). La extrapolación a tamaño infinito se realizó exclusivamente utilizando cálculos de DMC para distintos tamaños del sistema. Así demostramos que la dependecia de la energía con el tamaño del sistema en VMC y DMC no es la misma y que los valores extrapolados de la energía obtenidos por otros autores son artificialmente menores debido a haber asumido erróneamente que un sólo cálculo de DMC podía extrapolarse con resultados de VMC [13]. Sin embargo también demostramos que la dependencia de la energía de DMC con y sin backflow es muy similar, lo que permite utilizar cálculos sin backflow para extrapolar los cálculos con backflow (mucho más costosos computacionalmente). En el mismo trabajo calculamos la energía exacta de interacción utilizando un método de muestreo basado en el teorema de Hellmann-Feynman que permite calcular valores esperados de operadores que no conmutan con el Hamiltoniano del sistema, como es el caso de la energía de interacción, que es una función local en el espacio real. Así obtuvimos valores de las dos contribuciones

(energía cinética y energía de interacción) a la energía del estado fundamental del sistema.

Por otro lado, dado que los sólidos se simulan mediante sistemas finitos con condiciones de contorno periódicas, pueden aparecer errores asociados al tamaño finito que decaen muy lentamente debido a la naturaleza de largo alcance de la interacción de Coulomb (Coulomb finite-size effects, CFSE). Para realizar cálculos de QMC con una supercelda, generalmente se sustituye la interacción de Coulomb por la de Ewald. Otra opción es utilizar la interacción periódica modificada de Coulomb. Recientemente hemos introducido el promedio esférico del factor de estructura (en el espacio de los momentos) para analizar y corregir los CFSE [14]. El promedio esférico del factor de estructura representa una cantidad natural para analizar los errores de tamaño finito. Por un lado es una función simple unidimensional de cuya integral se puede calcular la energía de interacción. Por otro lado, ordena los datos de QMC con la escala de distancias de forma natural. QMC modela correctamente correlaciones a distancias cortas pero falla a largas distancias (momentos pequeños). Sin embargo, el comportamiento para momentos pequeños se conoce para varios sistemas, y esta información se puede utilizar para corregir el factor de estructura obtenido con QMC a largas distancias y a continuación integrarlo para obtener una energía de interacción corregida. Este método lo hemos aplicado con exito para calcular la energía de interacción en DMC de un gas de electrones no interactuante (Hartree-Fock) y de un gas de electrones interactuante de distintas densidades y tamaños del sistema. Basándonos en los resultados obtenidos en estos sistemas, hemos propuesto un método simple para tratar las correcciones en un sistema más complicado como puede ser la geometría de capas (slabs).

1.3.3. Hidruros de metales ligeros a altas presiones

Recientemente se ha intensificado el estudio de los hidruros de metales ligeros bajo presión por considerarse buenos candidatos para ser superconductores de alta temperatura. Contienen una fracción muy grande de hidrógeno, y se considera que su estudio es de gran interés para estudiar los fenómenos relacionados con el hidrógeno metálico. A presión ambiente son aislantes pero metalizan a una presión considerablemente menor que el hidrógeno metálico.

Función de respuesta de AlH₃

La presión modifica la propiedades electrónicas y ópticas de los sólidos de forma muy notable. Hemos realizado un estudio de la función de respuesta del AlH₃ y propiedades

ópticas de la fase metálica de AlH₃ [15]. Además del plasmón del tipo electrón libre y que está muy amortiguado, las transiciones entre estados electrónicos cercanos al nivel de Fermi que aparecen en la fase metálica dan lugar a un modo colectivo no amortiguado de baja energía. Esta característica debería poder medirse experimentalmente ya que induciría un pico abrupto en la reflectividad justo por debajo de 1 eV. El estudio lo hemos extendido a un sistema artificial donde los átomos de Al del AlH₃ se han reemplazado por un fondo homogéneo que compensa la carga. Así hemos encontrado que la subred de H resultante tiene unas propiedades electrónicas muy similares a las del AlH₃, de lo que se deduce que el AlH₃ es básicamente una red de hidrógeno perturbada debilmente por los átomos de Al.

Fases de alta presión en los hidruros de boro

Como ya se ha comentado, los hidruros bajo presión están siendo objeto de investigaciones teóricas y experimentales como candidatos a ser superconductores de alta temperatura. Estos hidruros contienen grandes fracciones de átomos de H y tienden a ser aislantes a bajas presiones y a metalizar a altas presiones. Experimentalmente no se ha observado la metalización del hidrógeno puro, ni tan siquiera a presiones tan elevadas como 340 GPa. Por tanto, los compuestos ricos en hidrógeno, que se espera que metalicen a presiones considerablemente menores, se consideran como un caso de estudio de gran interés para el conocimiento de los fenómenos relacionados con el hidrógeno metálico.

En esta línea, recientemente hemos abordado el estudio teórico de los hidruros de boro. En particular hemos comenzado con la estructura cristalina del B_4H_{10} en el rango de presiones comprendido entre 50 GPa y 300 GPa. Los resultados han mostrado que a ciertas presiones el B_4H_{10} muestra una posible disociación en unidades estructurales más pequeñas por lo que se ha ampliado el estudio a otras estequiometrías: B_4H_8 y B_4H_6 . Los primeros resultados obtenidos sugieren que la única estequiometría que no disocia en el rango de presiones estudiada es la B_4H_8 . Las estructuras predichas mediante algoritmos evolutivos, aunque tienen simetría muy baja, tienden a presentar una organización en cadenas que evolucionan a capas y redes tridimensionales a medida que aumenta la presión.

2 Trabajo futuro

El trabajo que me propongo realizar en un futuro próximo es, en cierto modo, una continuación del trabajo realizado hasta ahora, descrito muy brevemente en el capítulo anterior.

Lo he dividido en dos líneas de investigación que, en principio pueden considerarse independientes, y sin embargo pueden desarrollarse simultáneamente.

2.1. Cálculos de Monte Carlo cuántico de la función de respuesta de sólidos reales

Los cálculos de respuesta lineal dentro de la TDDFT a los que se ha hecho mención en el capítulo anterior son formalmente exactos y es el desconocimiento del kernel de canje y correlación (xc) y la necesidad de aproximarlo lo que los convierte en cálculos aproximados. Sin embargo, se ha visto que incluso una aproximación tan cruda como la ALDA puede explicar gran cantidad de características de algunos espectros experimentales.

A pesar de que el método de Monte Carlo de difusión (DMC) es una poderosa herramienta para computar propiedades de moléculas y sólidos, apenas se ha recurrido a este método para calcular la función de respuesta estática, una magnitud crucial en el análisis de los sistemas de muchos cuerpos y de la TDDFT. La razón fundamental es la dificultad técnica en el método más directo de realizar este cálculo: Para un potencial perturbativo dado se debe calcular la energía total para diferentes intensidades de la perturbación y determinar numéricamente la segunda derivada de la energía. Esto da la estimación DMC del término diagonal de la función de respuesta. Sin embargo, este proceso tiene varias dificultades: Se debe realizar un ciclo para las distintas intensidades del potencial, otro para cada punto k que se quiera muestrear y si se quisieran calcular términos no diagonales, un tercer ciclo sobre k'. Dentro de cada uno de estos ciclos debe realizarse una reoptimización completa de la función de onda y un cálculo DMC. Además la perturbación debe ser lo suficientemente débil para no modificar cualitativamente la función de onda, pero lo suficientemente fuerte para permitir unas derivadas numéricas sensibles.

Objetivos

El objetivo de este proyecto es calcular, mediante Monte Carlo cuántico, la función de respuesta estática de sólidos reales. En particular, nos centraremos en el caso de los semiconductores, ya que se trata de sistemas especialmente difíciles para la TDDFT.

Antecedentes

En 1995 Moroni y colaboradores [16] realizaron un estudio de DMC de la función de respuesta estática del gas de electrones en el régimen metálico utilizando el método descrito anteriormente. Calcularon el factor de campo local, G(q), que está estrechamente relacionado con el kernel de intercambio de correlación, $f_{\rm xc}(q)$, mediante el potencial de Coulomb $v_c(q)$ [$f_{\rm xc}(q) = -v_c(q)G(q)$]. Encontraron que el factor de campo local interpolaba suavemente entre sus valores asintóticos conocidos. De hecho parece que está completamente definido por sus asíntotas y para $q \leq 2q_F$ la aproximación de la densidad local de la teoría del funcional de la densidad lo describe con gran precisión.

Recientemente Gaudoin y Pitarke han descrito un método más eficiente [17] para calcular la función de respuesta de un sistema de muchos electrones mediante QMC. Este método (llamado Helmann-Feynman sampling, HFS) está basado en la aplicación del teorema de Hellmann-Feynman al propio algoritmo de DMC dando lugar a un nuevo algoritmo que muestrea correctamente la primera derivada de la energía, es decir, el valor esperado de un operador [18]. El método HFS ya se utilizó en el cálculo de la energía de interacción descrita en el apartado 1.3.2. En particular, extendiendo el análisis a la segunda derivada de la energía, da lugar a un algoritmo de DMC para calcular la función de respuesta estática de un sistema de muchos electrones en la aproximación del nodo congelado (frozen node, fn). Se le da este nombre porque incluso en el caso en el que la función de onda de prueba tuviera los nodos correctos, la función de respuesta calculada de este modo no es exacta ya que la función de respuesta real incluye los efectos de la variación de los nodos. En cualquier caso, la comparación con los resultados de Moroni demuestra que estos efectos pueden tenerse en cuenta generalizando el análisis de la RPA a los sistemas de nodo congelado. De hecho, el análisis que conduce a la RPA no menciona los nodos y por lo tanto debería ser aplicable igualmente a un sistema de nodo congelado. Este nuevo método puede aplicarse en un sólo cálculo DMC y en el caso de sistemas inhomogéneos puede proporcionar también elementos no diagonales de la respuesta, sin más complicación que con la que produce los elementos diagonales, sin necesidad de derivadas numéricas ni reoptimización.

Gaudoin y Pitarke han aplicado con éxito el método HFS a la respuesta de un gas de electrones uniforme no polarizado de varias densidades con objeto de analizar el efecto de los nodos y comparar los resultados con la literatura [17]. En particular, han observado que la respuesta del gas no interactuante (función de Lindhard) calculada en la aproximación fn $(\chi_0^{\rm fn})$ es sistemáticamente menor que la función real de Lindhard (χ_0) y por lo tanto es de esperar que la función de respuesta del gas interactuante ($\chi^{\rm fn}$) también será menor que la función de respuesta real (χ) . Sin embargo, asumiendo que el efecto del nodo fijo es el mismo en el cálculo del gas interactuante y no interactuante, todavía es posible extraer información significativa sobre la correlación y revertir el efecto de la aproximación del nodo congelado. El kernel f_{xc} de intercambio y correlación se define:

$$-f_{xc}(k) = \frac{1}{\chi(k)} - \frac{1}{\chi_{RPA}(k)}$$

$$= \frac{1}{\chi(k)} - \frac{1}{\chi_0(k)} + v_C(k)$$
(2.1)

$$= \frac{1}{\chi(k)} - \frac{1}{\chi_0(k)} + v_C(k) \tag{2.2}$$

donde $v_C(k)$ es el potencial de Coulomb y $\chi_{RPA}(k)$ es la respuesta cuando f_{xc} =0. En la práctica no tenemos acceso a $\chi(k)$, sino a su equivalente de tamaño finito en la aproximación fn. Moroni y colaboradores [16] incluyeron en su trabajo el efecto del cambio de los nodos y argumentaron que mientras la función de respuesta se ve afectada por los efectos de tamaño finito, f_{xc} no se ve afectado por éstos. De esta forma extraían f_{xc} de un cálculo de tamaño finito para añadírselo a la función de Lindhard calculada con una celda infinita. En principio no hay ninguna razón para esperar que la variación nodal en el sistema no interactuante describa correctamente la variación nodal en el sistema interactuante ya que los nodos del sistema de Kohn-Sham (KS) y los nodos del sistema real de muchas partículas no están relacionados. Además sistemas con diferente número de electrones también tienen diferentes nodos. A pesar de todo lo mencionado, se ha observado [16, 17] que f_{xc} es independiente de los efectos nodales y que los datos de f_{xc} calculado para distinto número de electrones son perfectamente compatibles entre sí. Por lo tanto, puede utilizarse para corregir las variaciones nodales incorrectas de la aproximación fn. Así, de la cantidades $\chi^{\rm fn}(k)$ y $\chi^{\rm fn}_{\rm RPA}(k)$ [o $\chi^{\rm fn}_0(k)$] calculadas mediante DMC en la aproximación fn, podemos extraer $f_{\rm xc}^{\rm fn}$ de la Eq.(2.1) [o Eq.(2.2)] y combinarla con los datos reales de $\chi_{\text{RPA}}(k)$ para obtener la respuesta exacta $\chi(k)$ de nuevo mediante la Eq.(2.1).

Gaudoin y Pitarke han aplicado este método (que no tiene en cuenta los efectos nodales en las cantidades de xc) para el gas de electrones homogéneo y han reproducido los datos de Moroni y colaboradores (que tienen en cuenta los cambios nodales a nivel de Kohn-Sham). El hecho de que ambos métodos den resultados concordantes de $f_{\rm xc}$, sugiere que asumir que a f_{xc} no le afectan los cambios nodales está justificado y que se obtiene una descripción del sistema con la variación nodal correcta.

Este método debería poder aplicarse al cálculo de la función de respuesta de sólidos reales mediante DMC, lo que no se ha realizado hasta la fecha.

Metodología

Se prepararán funciones de onda de prueba del tipo Slater-Jastrow: Utilizando el programa Quantum Espresso [19] se obtendrán los orbitales Kohn-Sham para la parte del determinante. La correlación se introducirá en la función de Jastrow, que deberá ser convenientemente optimizada. Se calculará la respuesta DMC dentro de la aproximación del nodo congelado para el caso interactuante y no interactuante para extraer el kernel $f_{\rm xc}$, el cual será analizado detalladamente. Con los orbitales de Kohn-Sham calcularemos la respuesta de Kohn Sham [20] que podrá ser corregida con el kernel obtenido mediante los cálculos de DMC para obtener la función de respuesta real.

Los cálculos de QMC realizados en sólidos son mucho más escasos que los realizados para moléculas o para el gas de electrones, tanto por su complejidad como por los recursos computacionales que consumen. No tendremos cálculos de DMC con los que comparar y por lo tanto en el proceso habrá que comprobar varios detalles como por ejemplo los efectos de tamaño finito sobre el kernel.

Nos proponemos abordar el estudio con la función de respuesta de seminconductores, y en particular con el silicio. Los fracasos de la TDDFT en el cálculo de los espectros ópticos de los semiconductores están bien documentados. La primera dificultad conocida desde principios de los 80 es que la teoría básica de la densidad local (LDA) subestima el gap de energía severamente. El problema del gap de energía de KS puede corregirse, por ejemplo, implementando la TDDFT sobre una estructura de bandas obtenida mediante un cálculo de muchos cuerpos como la GW [21, 22]. Sin embargo, incluso si el gap de energía se ha corregido, el cálculo de las propiedades ópticas no es fácil: La aproximación estándar de la aproximación local adiabática (ALDA) subestima el pico de baja energía comunmente conocido como "pico excitónico" consecuencia de la interacción entre un electrón en la banda de conducción y el hueco dejado tras de sí en la banda de valencia. Mejoras sobre la ALDA como la extensión adiabática de la GGA tampoco logran la descripción correcta. La aproximación de intercambio exacto en el marco de la TDDFT consigue describir el efecto excitónico en el Si, pero a costa de restringir el conjunto de estados incluidos en el cálculo para evitar el "colapso" de los espectros y ajustar así el resultado al experimento [23].

Reining y colaboradores [21, 22] han reformulado la ecuación de Bethe-Salpeter dentro del marco de la TDDFT dando lugar a un esquema ab initio consistente para el cálculo de espectros ópticos. Han demostrado que el kernel de xc obtenido de esta forma debe comportarse como α/q^2 cuando $q \to 0$, donde α es un parámetro empírico que igualan a -0,2 en el caso del Si. Con este $f_{\rm xc}$ y después de haber corregido las energías de KS con la aproximación GW han obtenido un espectro de Si en concordancia con el experimento. Pero esta aproximación sigue siendo computacionalmente demasiado exigente.

En los últimos años una nueva clase de funcionales aproximados ha emergido en la DFT del estado fundamental. Se conocen como meta-GGA (MGGA) y se caracterizan por depender no sólo de la densidad y de su gradiente, sino también de la energía cinética del sistema no interactuante (que depende de los orbitales KS que a su vez son funcionales no locales de la densidad). Por tanto los funcionales MGGA siguen siendo funcionales de la densidad, pero intrínsecamente no locales. Parece ser que su poder reside precisamente en su no localidad.

Muy recientemente, Nazarov y Vignale han demostrado que una aproximación adiabática basada en los funcionales MGGA conduce a una mejora muy significativa del cálculo de las propiedades ópticas de los semiconductores [24]. El hecho de que el uso de los funcionales MGGA implique una mejora en el gap de energía de KS se conoce desde hace tiempo [25] pero estos autores han demostrado que estos funcionales también pueden producir espectros ópticos precisos. Debido a que son funcionales adiabáticos se excluyen automáticamente los efectos de retardo, por lo que Nazarov y Vignale han concluido que la razón fundamental por la cual los funcionales MGGA funcionan es que tratan correctamente el largo alcance del potencial xc. Se sabe que este largo alcance, al que frecuentemente se le denomina "ultranolocalidad" (ultranonlocality) ha sido el problema para la TDDFT, especialmente en la aplicación de los sistemas extensos. En concreto, Nazarov y Vignale también han derivado un kernel f_{xc} del tipo α/q^2 para $q \to 0$, con una expresión explícita para α derivada de un funcional de energía de intercambio y correlación. En el caso de Si, han obtenido $\alpha = -0,267$, muy próximo al parámetro fijado por Reining y colaboradores. La ventaja de este método es que no hace uso de ningún tratamiento post-DFT como un shift de la energía de la cuasipartícula para corregir la energía del estado fundamental, sino que se aplica estrictamente dentro del marco de la TDDFT.

Colaboraciones

Para desarrolar esta línea de investigación contaré con la colaboración del Dr. René Gaudoin (Imperial College London) y del Prof. José María Pitarke (Universidad del País Vas-

co/Euskal Herriko Unibertsitatea, UPV/EHU). Así mismo, mantengo contacto frecuente con el grupo del Prof. Richard J. Needs (Universidad de Cambridge) que tiene una larga experiencia en cálculos de QMC.

Recursos

El trabajo que nos proponemos realizar es fundamentalmente computacional. Tendremos acceso a los recursos computacionales del Centro de Cálculo del Donostia International Physics Center (DIPC), que cuenta con más de 4500 procesadores en sus máquinas de computación. Asimismo podremos utilizar también los *clusters* del Servicio General de Informática Aplicada a la Investigación de la Universidad del País Vasco/Euskal Herriko Unibertsitatea, UPV/EHU.

2.2. Superconductividad inducida por presión

Las propiedades físicas de los materiales son extraordinariamente dependientes de su estructura y distancias interatómicas, las cuales pueden variarse de un modo efectivo variando la presión. Los avances experimentales basados en el desarrollo de las celdas de diamante han permitido alcanzar en el laboratorio presiones de varios millones de atmósferas y, al mismo tiempo, realizar medidas de gran precisión sobre los materiales sometidos a presión mediante la aplicación de técnicas muy variadas: difracción de rayos X, difracción de neutrones, dispersión Raman e infrarroja, resistividad, superconductividad,.... Si bien la naturaleza que nos rodea ya resulta fascinante a presión ambiente, los experimentos realizados a presiones elevadas permiten observar fenómenos físicos de gran interés y que en absoluto resultan fácilmente predecibles *a priori*.

Objetivos

El objetivo principal de este proyecto es predecir y conocer en profundidad el fundamento físico que permitee explicar las anomalías observadas en las propiedades estructurales, ópticas, electrónicas y superconductoras de materiales en el régimen de altas presiones. Asimismo, este conocimiento nos permitirá avanzar en el diseño de nuevos materiales a altas presiones, que aún no se han observado en condiciones normales, con posibles propiedades físicas de interés por sus aplicaciones en el ámbito tecnológico.

Antecedentes

Recientemente se ha observado superconductividad inducida por presión en metales ligeros como litio [26, 27], el calcio [28], y otros elementos sencillos [29].

En el caso del litio bajo presión, por ejemplo, se favorece la localización de los electrones en los intersticiales de forma que los estados p y d son más favorables. Esto produce una distorsión en la estructura de bandas y en la superficie de Fermi resultando similar a la del cobre en condiciones normales [30]. Por otro lado, la dispersión de fonones del litio se caracteriza por la presencia de un fonón blando inducido por la presión, correspondiente a un modo transversal, cuya inestabilidad permite explicar la complejidad estructural observada [31]. El momento para el que se observa la inestabilidad fonónica está correlacionado con el nesting que presenta la superficie de Fermi. Estas modificaciones en las propiedades electrónicas también producen importantes cambios en la función de respuesta electrónica. La localización electrónica inducida por la presión en el litio provoca que varios estados electrónicos caigan por debajo del nivel de Fermi, lo que permite la presencia de nuevas excitaciones ópticas entre bandas diferentes. Además del plasmón convencional, trabajos recientes predicen incluso la existencia de un nuevo plasmón interbanda de baja energía inducido por la presión y con una vida infinita, ya que no puede decaer via pares electrón-hueco [32]. También se ha encontrado que en la fase fcc, el plasmón asociado al gas de electrones libres reaparece en la segunda zona de Brillouin cuando los efectos de campo local cristalino son incorporados al cálculo. Además la dispersión de este plasmón más allá de la primera zona de Brillouin es muy anisotrópica incluso para la estructra compacta fcc [33].

En el caso del calcio bajo presión varios experimentos recientemente realizados indican que el calcio es superconductor en la estructura cúbica simple y alcanza una temperatura de transición de 25 K a 161 GPa, convirtiéndose en el elemento con la mayor Tc observada [28]. Sólo recientemente se ha demostrado de forma teórica la estabilidad mecánica de esta fase mediante la introducción de efectos anarmónicos en la estructura de fonones. De esta forma, se ha calculado una temperatura de transición similar a la experimental [34].

La superconductividad inducida por la presión en los elementos ligeros anteriormente citados, ha permitido recuperar la esperanza de que el hidrgeno metálico pueda ser un superconductor con una temperatura de transición muy elevada [35]. La obtención de dicha metalización resulta especialmente interesante ya que consistiría en el primer paso de una posible transición a un estado superconductor caracterizado por una temperatura de transición inusualmente elevada. La característica física fundamental para considerar al

hidrógeno metálico como un excelente candidato a ser un superconductor de elevada temperatura reside, fundamentalmente, en la elevada energía asociada al movimiento atómico y en una elevada interacción de los electrones con la red cristalina. Estas características también pueden estar presentes en aleaciones en las que el hidrógeno sea su principal componente, por lo que recientemente se han convertido en una alternativa al hidrógeno puro en la búsqueda de la superconductividad de alta temperatura basada en el hidrógeno [36]. Cuando estas aleaciones cristalizan, el hidrógeno presente en ellas ya se encuentra en un estado de pre-compresión química, por lo que es previsible que se necesite ejercer una presión considerablemente inferior para conseguir la transición metálica requerida. En esta línea se ha estudiado la metalización de varios hidruros del grupo IV como el CH₄ [37, 38], SiH₄ [39, 40, 41, 42, 43], GeH₄ [44, 45], o SnH₄ [46, 47], y del grupo III AlH₃ [48, 49], GaH₃ [50]. En particular, utilizando DFT y una técnica de búsqueda aleatoria se predijo la fase metálica de AlH3 a 73 GPa [48]. Poco después se encontró experimentalmente esta fase metálica con el mismo grupo espacial predicho por la teoría pero a 100 GPa [49]. Cálculos ópticos de esta fase se han descrito en el apartado 1.3.3. Recientemente se han realizado cálculos muy similares en el GaH₃ [50].

El éxito del MgB₂ [51] en la combinación efectiva de elementos ligeros para aumentar Tc, también ha impulsado el análisis de los efectos de la presión sobre las propiedades superconductoras de aleaciones ligeras. En concreto, recientes experimentos realizados sobre CaLi₂ [52, 53] confirman que la presión favorece estructuras altamente heterogéneas (aunque aún no se conoce con detalle su grupo espacial) con Tc=13 K a 81 GPa. Asimismo, los cambios electrónicos asociados a la presión permiten sintetizar nuevos materiales que no existen a presión ambiente. Por ejemplo, si bien el litio y el berilio no son miscibles a presión ambiente, recientes resultados indican que bajo presión pueden formar estructuras estables (Be₂Li) [54] con propiedades electrónicas y superconductoras de gran interés [55].

Metodología

En concreto, nos proponemos analizar los siguientes puntos:

 Caracterización estructural de los materiales bajo presión: La presión modifica las características de enlace entre los diferentes elementos químicos e induce transiciones estructurales, cuyo conocimiento es fundamental como paso previo para caracterizar sus propiedades electrónicas.

- 2. **Propiedades electrónicas de los materiales** Cálculo *ab initio* de las variaciones y anomalías que la presión induce en las propiedades electrónicas de los materiales y, en concreto, en la función de respuesta electrónica, dinámica y estática.
- 3. Propiedades superconductoras Considerando que recientes experimentos indican que la presión favorece la superconductividad, proponemos determinar Tc y las propiedades superconductoras de los candidatos interesantes cuyas estructuras hayamos caracterizado previamente.

La caracterización estructural se llevará a cabo mediante algoritmos evolutivos codificados en el programa CALYPSO, que utiliza el método de optimización de un enjambre de partículas (*particle swarm optimization*, PSO) [56], y en el programa USPEX, que utiliza algoritmos genéticos [57, 58, 59]. Ambos han demostrado su eficacia en la predicción de estructuras cristalinas de metales simples, hidruros de distintos tipos y aleaciones de metales ligeros en un amplio rango de presiones.

Las relajaciones estructurales y el cálculo de los ingredientes necesarios para el cálculo de las propiedades electrónicas y superconductoras (interacción electrón-fonón) de las estructuras predichas se realizará dentro del marco de la DFT y utilizando los programas VASP [60] y Quantum Espresso [19].

En particular, para calcular la función de respuesta se hará uso de un código recientemente desarrollado en el grupo [20] que hace uso de funciones de Wannier para la evaluación de los elementos de matriz (la parte más costosa del cálculo) y permite obtener resultados de una forma muy eficiente.

El primer sistema que nos proponemos analizar es la aleación de litio y boro. En la última década y desde el descubrimiento del superconductor de alta temperatura MgB_2 se han intentado buscar análogos estructurales y electrónicos que presenten las mismas propiedades superconductoras. El LiB $[(Li^+)_2B_2]$ es isovalente al $Mg^{2+}B_2$. Experimentalmente se ha encontrado que el LiB cristaliza en una estructura hexagonal $(\alpha$ -LiB) hasta 70 GPa [61]. Cálculos teóricos a presión ambiente basados en la estructura experimental α -LiB verifican fuertes enlaces B-B covalentes y conductividad similar a la del MgB_2 , pero debido a una estructura de bandas desfavorable cerca del nivel de Fermi, el acoplamiento electrón-fonón es muy débil y si existiera superconductividad, la T_c predicha sería muy baja [62]. Inspirados en el descubrimiento de superconductividad en las compuestos de grafito intercalado se han sugerido nuevas estructuras "sandwiches de metal" en las que capas hexagonales de B están separadas por capas triangulares de metal. A presión ambiente se ha encontrado que sus energías pueden ser competitivas con la de α -LiB pero

a presiones muy moderadas serían estructuras más favorables energéticamente y dinámicamente estables [63]. Se han calculado sus propiedades superconductoras y aunque las frecuencias de sus fonones son casi idénticas a las del MgB_2 , lo que demuestra que el LiB captura la física del MgB_2 , el acoplamiento electrón-fonón debido a la baja densidad de los estados p π de B cerca del nivel de Fermi es menor. El resultado es una T_c intermedia entre la del MgB_2 y la de los compuestos de grafito intercalados [64]. Se ha sugerido que una aleación de una fase de "sandwich de metal" con diboruros de metal estabilizaría estas fases y permitiría afinar su estructura electrónica hacia un superconductor del tipo MgB_2 [65]. Sin embargo recientes experimentos en LiB bajo presión no han conseguido encontrar las fases "sandwiches de metal" propuestas teóricamente [61].

Colaboraciones

Para desarrollar esta línea de investigación contaré con la colaboración de investigadores de la Universidad del País Vasco/Euskal Herriko Unibertsitatea, UPV/EHU: Prof. Aitor Bergara, Prof. Asier Eiguren y los estudiantes en formación Julen Ibañez y Ainhoa Suárez.

Este grupo de trabajo mantiene contacto frecuente con investigadores internacionales en este campo, en el ámbito teórico y experimental: Dr. Miguel Martínez-Canales (University College London), Dr. Ion Errea (Université Pierre et Marie Curie), Dr. Bruno Rousseau (University of Montreal), Prof. Y. Ma (Universidad de Jiling), Prof. A. Oganov (Stony Brook University), Prof. R. Hemley (Carnegie Institution), y O. Degtyareva y E. Gregoryanz (Center for Science at Extreme Conditions de la Universidad de Edinburgo).

Recursos

El trabajo propuesto es fundamentalmente computacional. Tendremos acceso a los recursos computacionales del Centro de Cálculo del Donostia International Physics Center (DIPC), que cuenta con más de 4500 procesadores en sus máquinas de computación. También podremos utilizar los *clusters* del Servicio General de Informática Aplicada a la Investigación de la Universidad del País Vasco/Euskal Herriko Unibertsitatea, UPV/EHU.

Bibliografía

- [1] I. G. Gurtubay, J. M. Pitarke, I. Campillo, y A. Rubio, Comp. Mater. Sci. 22, 123 (2001)
- [2] B. C. Larson, J. Z. Tischler, P. Zschack, O. Restrepo, I. G. Gurtubay, y A. G. Eguiluz, Collaborative Inelastic X-ray Scattering and First Principles Theory Investigations of the Dynamical Electronic Structure of Transition Metals and Transition Metal Oxides, Activity Report (Advanced Photon Source, 2002) www.aps.anl.gov/apsar2002/LARSONB2.PDF
- [3] I. G. Gurtubay, *Electronic Excitations in Solids: Dynamical Structure Factor and Quasiparticle Lifetimes*, Tesis Doctoral, Universidad del País Vasco/Euskal Herriko Unibertsitatea, UPV/EHU (2004)
- [4] I. G. Gurtubay, W. Ku, J. M. Pitarke, y A. G. Eguiluz, Comp. Mater. Sci. **30**, 104 (2004)
- [5] I. G. Gurtubay, J. M. Pitarke, W. Ku, A. G. Eguiluz, B. C. Larson, J. Z. Tischler, P. Zschack, y K. D. Finkelstein, Phys. Rev. B 72, 125117 (2005)
- [6] I. G. Gurtubay, W. Ku, J. M. Pitarke, A. G. Eguiluz, B. C. Larson, J. Z. Tischler, y P. Zschack, Phys. Rev. B 70, 201201 (2004)
- [7] V. P. Zhukov, F. Aryasetiawan, E. V. Chulkov, I. G. Gurtubay, y P. M. Echenique, Phys. Rev. B **64**, 195122 (2001)
- [8] I. G. Gurtubay, J. M. Pitarke, y P. M. Echenique, Phys. Rev. B 69, 245106 (2004)
- [9] J. M. Pitarke, I. G. Gurtubay, y V. U. Nazarov, Adv. Quantum Chem. 45, 247 (2004)
- [10] I. G. Gurtubay, N. D. Drummond, M. D. Towler, y R. J. Needs, J. Chem. Phys. 124, 024318 (2006)
- [11] I. G. Gurtubay y R. J. Needs, J. Chem. Phys. **127**, 124306 (2007)
- [12] M. G. Vergniory, V. M. Silkin, I. G. Gurtubay, y J. M. Pitarke, Phys. Rev. B 78, 155428 (2008)

- [13] I. G. Gurtubay, R. Gaudoin, y J. M. Pitarke, J. Phys.: Condensed Matter **22**, 065501 (2010)
- [14] R. Gaudoin, I. G. Gurtubay, y J. M. Pitarke, Phys. Rev. B 85, 125125 (2012)
- [15] I. G. Gurtubay, B. Rousseau, y A. Bergara, Phys. Rev. B 82, 085113 (2010)
- [16] S. Moroni, D. M. Ceperley, y G. .Senatore, Phys. Rev. Lett. 75, 689 (1995)
- [17] R. Gaudoin y J. M. Pitarke, Phys. Rev. B **81**, 245116 (2010)
- [18] R. Gaudoin y J. M. Pitarke, Phys. Rev. Lett **99**, 126406 (2007)
- [19] P. Giannozzi, S. Baroni, N. Bonini, M. Calandra, R. Car, C. Cavazzoni, D. Ceresoli, G. L. Chiarotti, M. Cococcioni, I. Dabo, A. Dal Corso, S. de Gironcoli, S. Fabris, G. Fratesi, R. Gebauer, U. Gerstmann, C. Gougoussis, A. Kokalj, M. Lazzeri, L. Martin-Samos, N. Marzari, F. Mauri, R. Mazzarello, S. Paolini, A. Pasquarello, L. Paulatto, C. Sbraccia, S. Scandolo, G. Sclauzero, A. P. Seitsonen, A. Smogunov, P. Umari, y R. M. Wentzcovitch, J. Phys. Condens Matter 21, 395502 (2009)
- [20] B. Rousseau, A. Eiguren, y A. Bergara, "Susceptibility calculations based on Wannier interpolation, the INTW program," Unpublished
- [21] L. Reining, V. Olevano, A. Rubio, y G. Onida, Phys. Rev. Lett. **88**, 066404 (2002)
- [22] F. Sottile, V. Olevano, y L. Reining, Phys. Rev. Lett. **91**, 056402 (2003)
- [23] Y.-H. Kim y A. Görling, Phys. Rev. Lett. **89**, 096402 (2002)
- [24] V. U. Nazarov y G. Vignale, Phys. Rev. Lett. **107**, 216402 (2011)
- [25] F. Tran y P. Blaha, Phys. Rev. Lett. **102**, 226401 (2011)
- [26] J. B. Neaton y N. W. Ashcroft, Nature **400**, 141 (1999)
- [27] N. Ashcroft, Nature **419**, 569 (2002)
- [28] T. Yabuuchi, T. Matsuoka, Y. Nakamoto, y K. Shimizu, J. Phys. Soc. Jpn. **75**, 083706 (2006)
- [29] J. S. Schilling, *Treatise on High Temperature Superconductivity* (Springer Verlag, 2006)
- [30] A. Rodriguez-Prieto y A. Bergara, Phys. Rev. B 72, 125406 (2005)

- [31] A. Rodriguez-Prieto, A. Bergara, V. M. Silkin, y P. M. Echenique, Phys. Rev. B 74, 172104 (2006)
- [32] A. Rodriguez-Prieto, V. Silkin, A. Bergara, y P. Echenique, New Journal of Physics **10**, 053035 (2008)
- [33] I. Errea, A. Rodriguez-Prieto, B. Rousseau, V. M. Silkin, y A. Bergara, Phys. Rev. B 81, 205105 (2010)
- [34] I. Errea, B. Rousseau, y A. Bergara, Phys. Rev. Lett. **106**, 165501 (2011)
- [35] N. Ashcroft, Phys. Rev. Lett. 21, 1748 (1968)
- [36] N. Ashcroft, Phys. Rev. Lett. **92**, 187002 (2004)
- [37] M. Martinez-Canales y A. Bergara, High Press. Res. 26, 369 (2006)
- [38] L. Sun, W. Yi, L. Wang, J. Shu, S. Sinogeikin, Y. Meng, G. Shen, L. Bai, Y. Li, J. Liu, H. Kwang Maob, y W. L. Maoe, Chem. Phys. Lett. 473, 72 (2009)
- [39] J. Feng, W. Grochala, T. Jaron, R. Hoffmann, A. Bergara, y N. W. Ashcroft, Phys. Rev. Lett. **96**, 017006 (2006)
- [40] C. J. Pickard y R. J. Needs, Phys. Rev. Lett. **97**, 045504 (2006)
- [41] Y. Yao, J. S. Tse, Y. Ma, y K. Tanaka, Europhys. Lett. **78**, 37003 (2007)
- [42] O. Degtyareva, M. Martinez-Canales, A. Bergara, X.-J. Chen, Y. Song, V. V. Struzhkin, H. Kwang Mao, y R. J. Hemley, Phys. Rev B **76**, 064123 (2007)
- [43] M. Martinez-Canales, A. R. Oganov, Y. Ma, Y. Yan, A. O. Lyakhov, y A. Bergara, Phys. Rev. Lett. 102, 087005 (2009)
- [44] M. Martinez-Canales, A. Bergara, J. Feng, y W. Grochala, J. Phys. Chem. Solids 67, 2095 (2006)
- [45] G. Gao, A. R. Oganov, A. Bergara, M. Martinez-Canales, T. Cui, T. Iitaka, Y. Ma, y G. Zou, Phys. Rev. Lett. 101, 107002 (2008)
- [46] J. S. Tse, Y. Yao, y K. Tanaka, Phys. Rev. Lett. 98, 117004 (2007)
- [47] G. Gao, A. R. Oganov, P. Li, Z. Li, H. Wang, T. Cui, Y. Ma, A. Bergara, A. O. Lyakhov, T. Iitaka, y G. Zou, Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A 107, 1317 (2010)

- [48] C. J. Pickard y R. J. Needs, Phys. Rev. B **76**, 144114 (2007)
- [49] I. Goncharenko, M. I. Eremets, M. Hanfland, J. S. Tse, M. Amboage, Y. Yao, y I. A. Trojan, Phys. Rev. Lett. 100, 045504 (2008)
- [50] G. Gao, H. Wang, A. Bergara, Y. Li, G. Liu, y Y. Ma, Phys. Rev. B **84**, 064118 (2011)
- [51] J. Nagamatsu, N. Nakagawa, T. Muranaka, Y. Zenitani, y J. Akimitsu, Nature **410**, 63 (2001)
- [52] J. Feng, N. W. Ashcroft, y R. Hofmann, Phys. Rev. Lett. 98, 247002 (2007)
- [53] T. Matsuoka, M. Debessai, J. J. Hamlin, A. K. Gangopadhyay, J. S. Schilling, y K. Shimizu, Phys. Rev. Lett. 100, 197003 (2008)
- [54] J. Feng, R. Hening, N. W. Ashcroft, y R. Hofmann, Nature **451**, 451 (2008)
- [55] I. Errea, M. Martinez-Canales, A.Oganov, y A. Bergara, High Press. Res.(2008)
- [56] Y. Wang, J. Lv, L. Zhu, y Y. Ma, Phys. Rev. B **82**, 094116 (2010)
- [57] A. R. Oganov, C. W. Glass, y S. Ono, Earth Planet. Sci. Lett. **241**, 95 (2006)
- [58] A. R. Oganov y C. W. Glass, J. Chem. Phys. **124**, 244704 (2006)
- [59] C. W. Glass, A. R. Oganov, y N. Hansen, Comput. Phys. Commun. 175, 713 (2006)
- [60] G. Kresse y J. Furthmüler, Phys. Rev. B **54**, 11169 (1996)
- [61] A. Lazicki, R. J. Hemley, W. E. Pickett, y C.-S. Yoo, Phys. Rev. B 82, 180102 (2010)
- [62] H. Rosner y W. E. Pickett, Phys. Rev. B **67**, 054104 (2003)
- [63] A. N. Kolmogorov y S. Curtarolo, Phys. Rev. B **73**, 180501 (2006)
- [64] M. Calandra, A. N. Kolmogorov, y S. Curtarolo, Phys. Rev. B **75**, 144506 (2007)
- [65] A. N. Kolmogorov, M. Calandra, y S. Curtarolo, Phys. Rev. B 78, 094520 (2008)