

eman ta zabal zazu



Universidad
del País Vasco

Euskal Herriko
Unibertsitatea



08/01/2016

Angel Rubio

accesso

INTELLIGENCE TO SHINE

Fecha	Titular/Medio	Pág.	Docs.
21/12/15	Un estudio dirigido por catedrático de la UPV/EHU demuestra que se pueden predecir los efectos de fotones en materiales / Noticias, vídeos y fotos en lainformacion.com Noticias, vídeos y fotos en lainformacion.com	4	1
21/12/15	Un cuanto de luz para la ciencia de materiales / Noods	5	2
21/12/15	MATERIALS EVOLUTION gana el XV Premio Manuel Laborde / Noods	7	2
21/12/15	Un estudio dirigido por catedrático de la UPV/EHU demuestra que se pueden predecir los efectos de fotones en materiales / Europa Press	9	1
21/12/15	Un estudio dirigido por catedrático de la UPV/EHU demuestra que se pueden predecir los efectos de fotones en materiales / El Economista.es	10	1
21/12/15	Un estudio dirigido por catedrático de la UPV/EHU demuestra que se pueden predecir los efectos de fotones en materiales / Telinteresa.es	11	1
21/12/15	Un estudio dirigido por catedrático de la UPV/EHU demuestra que se pueden predecir los efectos de fotones en materiales / Eldiario.es	12	1
21/12/15	Un estudio dirigido por catedrático de la UPV/EHU demuestra que se pueden predecir los efectos de fotones en materiales / 20 Minutos	13	1
21/12/15	Un estudio dirigido por catedrático de la UPV/EHU demuestra que se pueden predecir los efectos ... / Gente Digital	14	1
21/12/15	Argi-kuantu bat materialen zientziarako / Universidad del País Vasco	15	2
21/12/15	MATERIALS EVOLUTION-ek XV. Manuel Laborde Saria irabazi du / Universidad del País Vasco	17	2
21/12/15	Un cuanto de luz para la ciencia de materiales / Catalunya Vanguardista	19	2
21/12/15	Un cuanto de luz para la ciencia de materiales / Universidad del País Vasco	21	2
21/12/15	MATERIALS EVOLUTION gana el XV Premio Manuel Laborde / Universidad del País Vasco	23	2
23/12/15	A quantum of light for material science / Alpha Galileo	25	2
23/12/15	A quantum of light for material science University of the Basque Country 4m / EurekAlert!	27	2
23/12/15	A quantum of light for material science / Noods	29	2
23/12/15	A quantum of light for material science / trendssoul by özlem (yan) devrim	31	1

Fecha	Titular/Medio	Pág.	Docs.
24/12/15	Cuántica de la luz en la ciencia de materiales / Bitnavegantes	32	2
31/12/15	A quantum of light for material science / Space Daily	34	1

Noticias, vídeos y fotos en

<http://noticias.lainformacion.com/ciencia-y-tecnologia/ciencias-aplicadas/un-estudio-dirigido-por-catedratico-de-la-upv-ehu-demuestra-que-se-pueden-predecir-los->

Lun, 21 de dic de 2015 11:04

Audiencia: 48.410

Ranking: 6

VPE: 152

Página: 1

Tipología: blogs

Un estudio dirigido por catedrático de la UPV/EHU demuestra que se pueden predecir los efectos de fotones en materiales

Lunes, 21 de diciembre de 2015

Un estudio dirigido por el catedrático de la Universidad del País Vasco (UPV/EHU) y director del Max Planck Institute de Hamburgo, Ángel Rubio, demuestra que es posible predecir los efectos de los fotones sobre los materiales....

Un cuanto de luz para la ciencia de materiales

Lunes, 21 de diciembre de 2015

Euskal Herriko Unibertsitatea (via noodls) / Las simulaciones por ordenador que predicen el cambio inducido por la luz en las propiedades físicas y químicas de los sistemas complejos, moléculas, nanoestructuras y sólidos generalmente ignoran la naturaleza cuántica de la luz. Científicos del Instituto Max-Planck para la estructura y dinámica de la Materia (MPSD), dirigidos por el catedrático Ángel Rubio, del Departamento de Física de Materiales de la UPV/EHU y Director del Departamento de Teoría de la MPSD, han demostrado cómo pueden incluirse adecuadamente los efectos de los fotones en estos cálculos. Este estudio abre la posibilidad de predecir y controlar el cambio de las propiedades de los materiales debido a la interacción con los fotones desde los principios fundamentales. Los elementos básicos de los átomos, moléculas y sólidos son los núcleos, con carga positiva, y los electrones, cargados negativamente. Sus interacciones mutuas determinan la mayoría de las propiedades físicas y químicas de la materia, tales como la conductividad eléctrica o la absorción de la luz. Las leyes que rigen esta delicada interacción entre los electrones y los núcleos son las pertenecientes a la electrodinámica cuántica (QED), en la que las partículas interactúan mediante el intercambio de fotones, que son los cuantos de luz. Sin embargo, las ecuaciones de la QED son tan complejas que en la práctica los científicos tienen que simplificarlas para ser capaces de hacer cualquier predicción de materiales reales. Una simplificación muy común en química cuántica y física del estado sólido es despreciar la naturaleza cuántica de la luz. Aunque esta aceptación funciona bien para muchas aplicaciones, experimentos recientes han descubierto casos en los que la naturaleza cuántica de los fotones puede cambiar drásticamente las propiedades de los materiales y dar lugar a un nuevo comportamiento colectivo y de los fenómenos. Para simular este tipo de situaciones en ordenador y teniendo en cuenta que las técnicas de simulación estándar generalmente ignoran a los fotones, el departamento de teoría de la MPSD, dirigido por el profesor Ángel Rubio, ha desarrollado un método teórico novedoso que también incluye la interacción con los fotones. La idea básica es tratar todo el sistema QED de partículas y fotones como un fluido cuántico. En el mismo, las partículas están representadas por una corriente de carga, y los fotones por un campo electromagnético clásico que actúa sobre la corriente de una manera muy compleja. En una reciente publicación en la prestigiosa revista Proceedings of the National Academy of Sciences, los autores han demostrado que esta aproximación puede describir exactamente la dinámica de un electrón que está atrapado en una superficie y que interactúa fuertemente con fotones. 'La ventaja de esta reformulación del problema electrón-fotón acoplado es -dicen Johannes Flick y Michael Ruggenthaler,- que permite realizar aproximaciones que tratan a los fotones y las partículas en igualdad de condiciones. De esta manera, podemos llegar a nuevas técnicas de simulación que no desprecian los fotones y siguen siendo lo suficientemente simples para ser prácticas'. Después de esta prueba de concepto, en un siguiente paso, el equipo de Ángel

Audiencia: 26.607

Ranking: 5

VPE: 112

Página: 2

Tipología: online

Rubio quiere usar la técnica desarrollada para investigar sistemas complejos en situaciones donde se supone que los fotones juegan un papel importante y, por tanto, conocer cómo se modifican las propiedades de los materiales. 'Este estudio proporciona una nueva forma de controlar y alterar las reacciones químicas en los sistemas complejos, tales como biomoléculas, y diseñar nuevos estados de materia', indica el catedrático de la UPV/EHU Ángel Rubio. Referencia bibliográfica J. Flick, M. Ruggenthaler, H. Appel, A. Rubio. (2015) Kohn-Sham approach to quantum electrodynamical density-functional theory: Exact time-dependent effective potentials in real space. PNAS vol. 112 no. 50 <http://dx.doi.org/10.1073/pnas.1518224112> Foto: UPV/EHU

MATERIALS EVOLUTION gana el XV Premio Manuel Laborde

Lunes, 21 de diciembre de 2015

Euskal Herriko Unibertsitatea (via noodls) / La iniciativa Materials Evolution presentada por Yann Pouillon, Federico Iori y Ángel Rubio -vinculados al grupo de investigación Nano-Bio Spectroscopy Group de la UPV/EHU- ha sido galardonada con el primer premio Manuel Laborde Werlinden, en su décimo quinta edición, a la mejor iniciativa empresarial con base tecnológica basada en ideas innovadoras. El proyecto presentado consiste en un servicio que, a través de potentes métodos de simulación, consiguen la modelización de la materia. Ello permite acelerar de forma sustancial los procesos de descubrimiento y síntesis industrial de nuevos materiales. Así mismo, ha recibido el 2º Premio, con una dotación económica 3.000 €, la iniciativa IdOMICS BIOTECH, presentado por Uxune Etxeberria, por una iniciativa que es capaz de utilizar la metabolómica para identificar y caracterizar productos agroalimentarios, lo cual representa un valor añadido para la seguridad y fiabilidad en su consumo. Además, las propuestas innovadoras y/o de base tecnológica podrán optar a las ayudas gestionadas por BIC GIPUZKOA BERRILAN y articuladas por el Departamento Foral de Promoción Económica, Medio Rural y Equilibrio Territorial de Gipuzkoa y por SPRI, dependiente de Gobierno Vasco-Eusko Jaurlaritza. Estas ayudas podrán alcanzar la suma de 60.000 euros, dependiendo del grado de innovación e interés de los proyectos. Esta décimo quinta edición del Premio Manuel Laborde Werlinden se promueve dentro del marco del Programa ENTREPRENARI, desarrollado y gestionado por la UPV/EHU (Campus de Gipuzkoa) y el Centro Europeo de Empresas e Innovación Bic Gipuzkoa Berrilan, y cuyo objetivo es el fomento, asesoramiento y apoyo a los emprendedores, y a la creación de empresas innovadoras en el Campus de Gipuzkoa de la UPV/EHU. El Premio está dirigido al personal docente e investigador de la UPV/EHU; a empresas que deciden explotar los resultados de una investigación realizada en colaboración con la UPV/EHU, a través de la creación de una nueva empresa; y a titulados, postgraduados o alumnado de último curso de la UPV/EHU. El Premio tiene como objetivos principales: Fomentar ideas y proyectos de emprendizaje en el entorno universitario. Apoyar y difundir la cultura empresarial en el colectivo universitario. Aprovechar el potencial innovador de la Universidad para la creación y desarrollo de nuevas empresas. Favorecer nuevas fórmulas de apoyo al empleo en nuestro entorno. Un total de trece proyectos optaban al galardón a la mejor iniciativa empresarial basada en una idea innovadora. En el acto de entrega de los premios han participado Ana Arrieta, vicerrectora del Campus de Gipuzkoa de la UPV/EHU; Ainhoa Aizpuru, diputada de Promoción Económica, Medio Rural y Equilibrio Territorial de la Diputación Foral de Gipuzkoa; Aitor Urzelai, director de Emprendimiento, Innovación y Sociedad de la Información, Desarrollo Económico y Competitividad de Gobierno Vasco; y Marisa Arriola, directora gerente de Bic Gipuzkoa Berrilan. Durante el acto el profesor Luis M. Liz-Marzán, director científico de CIC biomaGUNE, ha impartido la ponencia titulada 'Investigación en biomateriales y beneficio social. Perspectiva desde CIC biomaGUNE'. En el mismo

Audiencia: 26.607

Ranking: 5

VPE: 112

Página: 2

Tipología: online

acto, se han entregado los Premios THINK BIG 2015, edición Gipuzkoa: 1er Premio, dotado con 2.500 €, a la iniciativa 'INDIE TOTEM', plataforma on-line de promoción y comercialización de videojuegos independientes para Pc, presentado por Xabier Linazisoro procedente del Grado de Ingeniería Informática. 2º Premio, dotado con 1.500 €, a la iniciativa 'Eskalada ergonomía hobetzeko inder neurgailua: Sistema Bindar de apoyo para la escalada', presentado por Iñigo Mugica y Sever Iruretagoiena procedentes del Grado de Ingeniería Mecánica y del Grado en Ciencias de la Actividad Física y el Deporte. Foto: UPV/EHU

Un estudio dirigido por catedrático de la UPV/EHU demuestra que se pueden predecir los efectos de fotones en materiales

Lunes, 21 de diciembre de 2015

SAN SEBASTIÁN, 21 Dic. (EUROPA PRESS) - Un estudio dirigido por el catedrático de la Universidad del País Vasco (UPV/EHU) y director del Max Planck Institute de Hamburgo, Ángel Rubio, demuestra que es posible predecir los efectos de los fotones sobre los materiales. En un comunicado, fuentes de la UPV/EHU han explicado que científicos del Instituto Max-Planck para la estructura y dinámica de la Materia (MPSD), dirigidos por el catedrático Ángel Rubio, del departamento de Física de Materiales de la UPV/EHU y director del departamento de Teoría de la MPSD, han demostrado cómo pueden incluirse adecuadamente los efectos de los fotones en estos cálculos. Según han señalado, "este estudio abre la posibilidad de predecir y controlar el cambio de las propiedades de los materiales debido a la interacción con los fotones desde los principios fundamentales". Las interacciones de los elementos básicos de los átomos, moléculas y sólidos son los núcleos, con carga positiva, y los electrones, cargados negativamente, determinan la mayoría de las propiedades físicas y químicas de la materia, y se rigen por leyes de la electrodinámica cuántica (QED), en la que las partículas interactúan mediante el intercambio de fotones, que son los cuantos de luz. Las ecuaciones de la QED son tan complejas que en la práctica los científicos tienen que simplificarlas. En este sentido, desde la UPV/EHU explican que "una simplificación muy común en química cuántica y física del estado sólido es despreciar la naturaleza cuántica de la luz". El equipo de Rubio ha desarrollado un método teórico que también incluye la interacción con los fotones. Los autores de esta investigación, publicada en la revista Proceedings of the National Academy of Sciences, ha demostrado que esta aproximación puede describir exactamente la dinámica de un electrón que está atrapado en una superficie y que interactúa fuertemente con fotones. "Este estudio proporciona una nueva forma de controlar y alterar las reacciones químicas en los sistemas complejos, tales como biomoléculas, y diseñar nuevos estados de materia", ha indicado Rubio.

Un estudio dirigido por catedrático de la UPV/EHU demuestra que se pueden predecir los efectos de fotones en materiales

Lunes, 21 de diciembre de 2015

Un estudio dirigido por el catedrático de la Universidad del País Vasco (UPV/EHU) y director del Max Planck Institute de Hamburgo, Ángel Rubio, demuestra que es posible predecir los efectos de los fotones sobre los materiales. SAN SEBASTIÁN, 21 (EUROPA PRESS) En un comunicado, fuentes de la UPV/EHU han explicado que científicos del Instituto Max-Planck para la estructura y dinámica de la Materia (MPSD), dirigidos por el catedrático Ángel Rubio, del departamento de Física de Materiales de la UPV/EHU y director del departamento de Teoría de la MPSD, han demostrado cómo pueden incluirse adecuadamente los efectos de los fotones en estos cálculos. Según han señalado, "este estudio abre la posibilidad de predecir y controlar el cambio de las propiedades de los materiales debido a la interacción con los fotones desde los principios fundamentales". Las interacciones de los elementos básicos de los átomos, moléculas y sólidos son los núcleos, con carga positiva, y los electrones, cargados negativamente, determinan la mayoría de las propiedades físicas y químicas de la materia, y se rigen por leyes de la electrodinámica cuántica (QED), en la que las partículas interactúan mediante el intercambio de fotones, que son los cuantos de luz. Las ecuaciones de la QED son tan complejas que en la práctica los científicos tienen que simplificarlas. En este sentido, desde la UPV/EHU explican que "una simplificación muy común en química cuántica y física del estado sólido es despreciar la naturaleza cuántica de la luz". El equipo de Rubio ha desarrollado un método teórico que también incluye la interacción con los fotones. Los autores de esta investigación, publicada en la revista Proceedings of the National Academy of Sciences, ha demostrado que esta aproximación puede describir exactamente la dinámica de un electrón que está atrapado en una superficie y que interactúa fuertemente con fotones. "Este estudio proporciona una nueva forma de controlar y alterar las reacciones químicas en los sistemas complejos, tales como biomoléculas, y diseñar nuevos estados de materia", ha indicado Rubio.

Un estudio dirigido por catedrático de la UPV/EHU demuestra que se pueden predecir los efectos de fotones en materiales

Lunes, 21 de diciembre de 2015

Un estudio dirigido por el catedrático de la Universidad del País Vasco (UPV/EHU) y director del Max Planck Institute de Hamburgo, Ángel Rubio, demuestra que es posible predecir los efectos de los fotones sobre los materiales. En un comunicado, fuentes de la UPV/EHU han explicado que científicos del Instituto Max-Planck para la estructura y dinámica de la Materia (MPSD), dirigidos por el catedrático Ángel Rubio, del departamento de Física de Materiales de la UPV/EHU y director del departamento de Teoría de la MPSD, han demostrado cómo pueden incluirse adecuadamente los efectos de los fotones en estos cálculos. Según han señalado, "este estudio abre la posibilidad de predecir y controlar el cambio de las propiedades de los materiales debido a la interacción con los fotones desde los principios fundamentales". Las interacciones de los elementos básicos de los átomos, moléculas y sólidos son los núcleos, con carga positiva, y los electrones, cargados negativamente, determinan la mayoría de las propiedades físicas y químicas de la materia, y se rigen por leyes de la electrodinámica cuántica (QED), en la que las partículas interactúan mediante el intercambio de fotones, que son los cuantos de luz. Las ecuaciones de la QED son tan complejas que en la práctica los científicos tienen que simplificarlas. En este sentido, desde la UPV/EHU explican que "una simplificación muy común en química cuántica y física del estado sólido es despreciar la naturaleza cuántica de la luz". El equipo de Rubio ha desarrollado un método teórico que también incluye la interacción con los fotones. Los autores de esta investigación, publicada en la revista *Proceedings of the National Academy of Sciences*, ha demostrado que esta aproximación puede describir exactamente la dinámica de un electrón que está atrapado en una superficie y que interactúa fuertemente con fotones. "Este estudio proporciona una nueva forma de controlar y alterar las reacciones químicas en los sistemas complejos, tales como biomoléculas, y diseñar nuevos estados de materia", ha indicado Rubio. Un estudio dirigido por catedrático de la UPV/EHU demuestra que se pueden predecir los efectos de fotones en materiales

Un estudio dirigido por catedrático de la UPV/EHU demuestra que se pueden predecir los efectos de fotones en materiales

Lunes, 21 de diciembre de 2015

Un estudio dirigido por el catedrático de la Universidad del País Vasco (UPV/EHU) y director del Max Planck Institute de Hamburgo, Ángel Rubio, demuestra que es posible predecir los efectos de los fotones sobre los materiales. En un comunicado, fuentes de la UPV/EHU han explicado que científicos del Instituto Max-Planck para la estructura y dinámica de la Materia (MPSD), dirigidos por el catedrático Ángel Rubio, del departamento de Física de Materiales de la UPV/EHU y director del departamento de Teoría de la MPSD, han demostrado cómo pueden incluirse adecuadamente los efectos de los fotones en estos cálculos. Según han señalado, "este estudio abre la posibilidad de predecir y controlar el cambio de las propiedades de los materiales debido a la interacción con los fotones desde los principios fundamentales". Las interacciones de los elementos básicos de los átomos, moléculas y sólidos son los núcleos, con carga positiva, y los electrones, cargados negativamente, determinan la mayoría de las propiedades físicas y químicas de la materia, y se rigen por leyes de la electrodinámica cuántica (QED), en la que las partículas interactúan mediante el intercambio de fotones, que son los cuantos de luz. Las ecuaciones de la QED son tan complejas que en la práctica los científicos tienen que simplificarlas. En este sentido, desde la UPV/EHU explican que "una simplificación muy común en química cuántica y física del estado sólido es desprestigiar la naturaleza cuántica de la luz". El equipo de Rubio ha desarrollado un método teórico que también incluye la interacción con los fotones. Los autores de esta investigación, publicada en la revista Proceedings of the National Academy of Sciences, ha demostrado que esta aproximación puede describir exactamente la dinámica de un electrón que está atrapado en una superficie y que interactúa fuertemente con fotones. "Este estudio proporciona una nueva forma de controlar y alterar las reacciones químicas en los sistemas complejos, tales como biomoléculas, y diseñar nuevos estados de materia", ha indicado Rubio.

Un estudio dirigido por catedrático de la UPV/EHU demuestra que se pueden predecir los efectos de fotones en materiales

Lunes, 21 de diciembre de 2015

Un estudio dirigido por el catedrático de la Universidad del País Vasco (UPV/EHU) y director del Max Planck Institute de Hamburgo, Ángel Rubio, demuestra que es posible predecir los efectos de los fotones sobre los materiales. Un estudio dirigido por el catedrático de la Universidad del País Vasco (UPV/EHU) y director del Max Planck Institute de Hamburgo, Ángel Rubio, demuestra que es posible predecir los efectos de los fotones sobre los materiales. En un comunicado, fuentes de la UPV/EHU han explicado que científicos del Instituto Max-Planck para la estructura y dinámica de la Materia (MPSD), dirigidos por el catedrático Ángel Rubio, del departamento de Física de Materiales de la UPV/EHU y director del departamento de Teoría de la MPSD, han demostrado cómo pueden incluirse adecuadamente los efectos de los fotones en estos cálculos. Según han señalado, "este estudio abre la posibilidad de predecir y controlar el cambio de las propiedades de los materiales debido a la interacción con los fotones desde los principios fundamentales". Las interacciones de los elementos básicos de los átomos, moléculas y sólidos son los núcleos, con carga positiva, y los electrones, cargados negativamente, determinan la mayoría de las propiedades físicas y químicas de la materia, y se rigen por leyes de la electrodinámica cuántica (QED), en la que las partículas interactúan mediante el intercambio de fotones, que son los cuantos de luz. Las ecuaciones de la QED son tan complejas que en la práctica los científicos tienen que simplificarlas. En este sentido, desde la UPV/EHU explican que "una simplificación muy común en química cuántica y física del estado sólido es despreciar la naturaleza cuántica de la luz". El equipo de Rubio ha desarrollado un método teórico que también incluye la interacción con los fotones. Los autores de esta investigación, publicada en la revista Proceedings of the National Academy of Sciences, ha demostrado que esta aproximación puede describir exactamente la dinámica de un electrón que está atrapado en una superficie y que interactúa fuertemente con fotones. "Este estudio proporciona una nueva forma de controlar y alterar las reacciones químicas en los sistemas complejos, tales como biomoléculas, y diseñar nuevos estados de materia", ha indicado Rubio. Síguenos en

Un estudio dirigido por catedrático de la UPV/EHU demuestra que se pueden predecir los efectos ...

Lunes, 21 de diciembre de 2015

SAN SEBASTIÁN, 21 (EUROPA PRESS) Un estudio dirigido por el catedrático de la Universidad del País Vasco (UPV/EHU) y director del Max Planck Institute de Hamburgo, Ángel Rubio, demuestra que es posible predecir los efectos de los fotones sobre los materiales. En un comunicado, fuentes de la UPV/EHU han explicado que científicos del Instituto Max-Planck para la estructura y dinámica de la Materia (MPSD), dirigidos por el catedrático Ángel Rubio, del departamento de Física de Materiales de la UPV/EHU y director del departamento de Teoría de la MPSD, han demostrado cómo pueden incluirse adecuadamente los efectos de los fotones en estos cálculos. Según han señalado, "este estudio abre la posibilidad de predecir y controlar el cambio de las propiedades de los materiales debido a la interacción con los fotones desde los principios fundamentales". Las interacciones de los elementos básicos de los átomos, moléculas y sólidos son los núcleos, con carga positiva, y los electrones, cargados negativamente, determinan la mayoría de las propiedades físicas y químicas de la materia, y se rigen por leyes de la electrodinámica cuántica (QED), en la que las partículas interactúan mediante el intercambio de fotones, que son los cuantos de luz. Las ecuaciones de la QED son tan complejas que en la práctica los científicos tienen que simplificarlas. En este sentido, desde la UPV/EHU explican que "una simplificación muy común en química cuántica y física del estado sólido es despreciar la naturaleza cuántica de la luz". El equipo de Rubio ha desarrollado un método teórico que también incluye la interacción con los fotones. Los autores de esta investigación, publicada en la revista Proceedings of the National Academy of Sciences, ha demostrado que esta aproximación puede describir exactamente la dinámica de un electrón que está atrapado en una superficie y que interactúa fuertemente con fotones. "Este estudio proporciona una nueva forma de controlar y alterar las reacciones químicas en los sistemas complejos, tales como biomoléculas, y diseñar nuevos estados de materia", ha indicado Rubio.

Argi-kuantu bat materialen zientziarako

Lunes, 21 de diciembre de 2015

Sistema konplexuen, molekulen, nanoegituren eta solidoen propietate fisiko eta kimikoetan argiak induzitutako aldaketak iragartzeko ordenagailu bidezko simulazioek, oro har, ez dute kontuan hartzen argiaren izaera kuantikoa. Materiaren egitura eta dinamikarako Max Planck Institutuko (MPSD) ikertzaile batzuek, Ángel Rubio UPV/EHUko Materialen Fisikako saileko katedradun eta MPSDko Teoria saileko zuzendaria buru zutela, frogatu dute posible dela fotoien eragina behar bezala txertatzea kalkulu horietan. Azterketa horri esker, fotoiekin izandako elkarrekintzaren eraginez materialetan gertatzen diren propietate-aldaketak iragarri eta kontrolatu ahal izango dira, oinarrizko printzipioetatik hasita. Atomoen, molekulen eta solidoen oinarrizko elementuak nukleoak eta elektroiak dira (karga positiboa eta negatiboa dute, hurrenez hurren). Batzuek besteekin dituzten elkarrekintzek zehazten dituzte materiaren propietate fisiko eta kimiko gehienak, hala nola eroankortasun elektrikoa edo argi-xurgapena. Elektroien eta nukleoen arteko elkarrekintza ahul horren atzean dauden legeak elektrodinamika kuantikoari dagozkio (QED); haren arabera, fotoiak, hau da, argi-kuantuak, elkarbanatuz gertatzen da partikulen arteko elkarrekintza. Alabaina, QEDaren ekuazioak hain konplexuak dira, ezen zientzialariek, praktikan, sinplifikatu egin behar izaten baitituzte egiazko materialen iragarpenak egiteko. Kimika kuantikoan eta egoera solidoaren fisikan, askotan, argiaren izaera kuantikoa arbuatzen da. Hori onartzeak emaitza ona ematen badu ere aplikazio askotarako, berriki egindako esperimenduetan ikusi da zenbaitetan fotoien izaera kuantikoaren eraginez goitik behera alda daitezkeela materialen propietateak, eta talde portaera eta fenomeno berriak ager daitezkeela. Ordenagailuan halako egoerak simulatzeko, eta kontuan izanda simulazio-teknika estandarrek, oro har, fotoiak alde batera uzten dituztela, MPSDko Teoria sailak, Angel Rubio irakasleak zuzenduta, metodo teoriko berri bat garatu du, zeinak kontuan hartzen baitu fotoiekin izaten den elkarrekintza. Oinarrizko ideia da partikulen eta fotoien QED sistema osoa fluido kuantiko gisa hartzea. Bertan, partikulak karga-korronte bidez adierazten dira, eta, fotoiak, ohiko eremu elektromagnetiko bidez, zeinak modu oso konplexuan eragiten baitu korrontearen gain. Berriki Proceedings of the National Academy of Sciences aldizkarian argitaratu duten lanean, egileek frogatu dute hurbilketa horren bidez zehatz-mehatz deskriba daitezkeela gainazal batean harrapatuta dagoen eta fotoiekin elkarrekintza bortitzean dagoen elektroien baten dinamika. "Elektroi-fotoi akoplatuaren arazoa birformulatzearen abantaila da diote Johannes Flick eta Michael Ruggenthaler ikertzaileek horren bidez egiten diren hurbilpenetan kondizio beretan tratatzen direla fotoiak eta partikulak. Hala, fotoiak arbuatzen ez dituzten eta praktikoak izaten jarraitzeko nahikoa sinpleak diren simulazio-teknikak sor ditzakegu". Kontzeptu-froga hori lortuta, hurrengo urrats batean, garatutako teknika erabili nahi du, Ángel Rubioren taldeak, sistema konplexuak ikertzeko fotoiak ustez oso zeregin garrantzitsua duten egoeretan, eta, hala, jakiteko nola aldatzen diren materialen propietateak. "Sistema konplexuetan, hala nola biomolekuletan, erreakzio kimikoak kontrolatzeko bide berri bat ematen du ikerketa horrek, bai eta

Audiencia: 8.423

Ranking: 5

VPE: 86

Página: 2

Tipología: online

materiaren egoera berriak diseinatzeko aukera ere", adierazi du UPV/EHUko katedradun Ángel Rubiok. Bibliografia-erreferentziak: J. Flick, M. Ruggenthaler, H. Appel, A. Rubio. (2015) "Kohn-Sham approach to quantum electrodynamical density-functional theory: Exact time-dependent effective potentials in real space". PNAS vol. 112 no. 50 <http://dx.doi.org/10.1073/pnas.1518224112> Argazkia: UPV/EHU

MATERIALS EVOLUTION-ek XV. Manuel Laborde Saria irabazi du

Lunes, 21 de diciembre de 2015

ko ikerketa-taldearekin lotutako Yann Pouillon, Federico Iori eta Ángel Rubio ikertzaileek aurkeztu duten Materials Evolution ekimenak MANUEL LABORDE WERDERLINE lehen saria jaso du, hamabosgarren edizioan, funtsean ideia berritzaileen arabeko oinarri teknologikoko enpresa-ekimen onena izateagatik. Aurkeztutako proiektua, simulazio-metodo ahaltsuen bidez materiaren modelizazioa lortzen duen zerbitzua da. Material berriak aurkitzeko eta sintetizatzeko eta prozesuak zeharo azeleratzeko erabili ahal izango da. Halaber, Uxune Etxeberriak aurkeztutako idOMICS BIOTECH ekimenak 2. saria eta 3.000 ¤-ko diru-kopurua jaso du. Nekazaritzako elikagaiak identifikatzeko eta karakterizatzeko metabolomika erabiltzen duen ekimena horrek balio erantsia ematen dio elikagaiok segurtasunez eta fidagarritasunez kontsumitzeko. Gainera, proposamen berritzaileek eta/edo oinarri teknologikoa dutenek BIC GIPUZKOA BERRILANek kudeatutako eta Ekonomia Sustapena, Landa Ingurunea eta Lurralde Orekako Foru Departamentuak eta Eusko Jaurlaritzaren menpe dagoen SPRIk artikulatutako laguntzak jaso ahal izango dituzte. Laguntza horiek 60.000 eurokoak izatea iritsi daitezke, proiektuen berrikuntza eta interes mailaren arabera. Manuel Laborde Werlinden sariaren hamabosgarren edizio hau ENTREPRENARI Programaren barruan sustatzen da. Programa hori UPV/EHUk (Gipuzkoako campusak) eta Bic Gipuzkoa Berrilan Enpresa eta Berrikuntzara Zentro Europarrak garatu eta kudeatu dute eta bere helburua ekintzaileak sustatzea eta haiei, aholkularitza eta laguntza ematea eta enpresa berritzaileak sortzea UPV/EHUko Gipuzkoako Campusean. Saria UPV/EHUko irakasle eta ikertzaileentzat da eta, halaber, enpresa berria sortuz UPV/EHUrekin batera egindako ikerketaren emaitzak ustiatzea erabakitzen duten enpresentzat eta UPV/EHUko tituludun, graduondoko eta azken urteko ikasleentzat. Sariaren helburu nagusiak honako hauek dira: Ekintzailatza ideiak eta proiektuak sustatzea, unibertsitate inguruan. Enpresa-kultura bultzatzea eta zabaltzea unibertsitateko kolektiboan. Unibertsitateak duen ahalmen berritzailea aprobetxatzea enpresa berriak sortu eta garatzeko. Gure inguruan enplegua bultzatzeko formula berriak bideratzea. Hamahiru proiektu aurkeztu ziren ideia berritzaile batean oinarritutako enpresa-ekimenik onena izateko saria irabazteko asmoz. Sari banaketaren ekitaldian honako hauek parte hartu dute: Ana Arrieta, UPV/EHUko Gizpuzkoako Campuseko errektoreordea; Ainhoa Aizpuru, Gipuzkoako Foru Aldundiko Ekonomia Sustapena, Landa Ingurunea eta Lurralde Orekako diputatua; Aitor Urzelai, Eusko Jaurlaritzaren Ekintzailatza, Berrikuntza eta Informazio Gizartea, Ekonomiaren Garapena eta Lehiakortasunaren zuzendaria eta Marisa Arriola, Bic Gipuzkoa Berrilaneke zuzendari kudeatzailea. Ekitaldian, CIC biomaGUNEko zuzendari zientifikoa den Luis M. Liz-Marzan, irakasleak, "Investigación en biomateriales y beneficio social" izeneko txostena azaldu du. CIC biomaGUNETiko ikuspegiaE kitaldi berean, THINK BIG 2015 sariak eman dira Gipuzkoako edizioan: 1. saria eta 2.500 ¤-ko diru-kopurua, "INDE TOTEM" ekimenari. Pc-rako bideo-joko independenteak sustatzeko eta merkaturatzeko on-line plataforma da. Ingeniaritza

Audiencia: 8.423

Ranking: 5

VPE: 86

Página: 2

Tipología: online

Informatikoko Graduak Xabier Linazasorok aurkeztu zuen. 2. saria, eta 1.500 €-ko diru-kopurua, "Eskalada ergonomia hobetzeko inder neurgailua" izeneko ekimenari: Ingeniaritza Mekanikoko Graduak eta Jarduera Fisikoaren eta Kirolaren Zientzien Graduak Iñigo Mugica-k eta Seber Iruretagoienak aurkeztu zuten. Argazkia: UPV/EHU

Un cuanto de luz para la ciencia de materiales

Lunes, 21 de diciembre de 2015

Dirigido por el catedrático de la UPV/EHU y director del Max Planck Institute de Hamburgo Ángel Rubio. Un estudio demuestra que es posible predecir los efectos de los fotones sobre los materiales. Las simulaciones por ordenador que predicen el cambio inducido por la luz en las propiedades físicas y químicas de los sistemas complejos, moléculas, nanoestructuras y sólidos generalmente ignoran la naturaleza cuántica de la luz. Científicos del Instituto Max-Planck para la estructura y dinámica de la Materia (MPSD), dirigidos por el catedrático Ángel Rubio, del Departamento de Física de Materiales de la UPV/EHU y Director del Departamento de Teoría de la MPSD, han demostrado cómo pueden incluirse adecuadamente los efectos de los fotones en estos cálculos. Este estudio abre la posibilidad de predecir y controlar el cambio de las propiedades de los materiales debido a la interacción con los fotones desde los principios fundamentales. UPV/EHU. Los elementos básicos de los átomos, moléculas y sólidos son los núcleos, con carga positiva, y los electrones, cargados negativamente. Sus interacciones mutuas determinan la mayoría de las propiedades físicas y químicas de la materia, tales como la conductividad eléctrica o la absorción de la luz. Una simplificación muy común en química cuántica y física del estado sólido es despreciar la naturaleza cuántica de la luz. Las leyes que rigen esta delicada interacción entre los electrones y los núcleos son las pertenecientes a la electrodinámica cuántica (QED), en la que las partículas interactúan mediante el intercambio de fotones, que son los cuantos de luz. Sin embargo, las ecuaciones de la QED son tan complejas que en la práctica los científicos tienen que simplificarlas para ser capaces de hacer cualquier predicción de materiales reales. Una simplificación muy común en química cuántica y física del estado sólido es despreciar la naturaleza cuántica de la luz. Aunque esta aceptación funciona bien para muchas aplicaciones, experimentos recientes han descubierto casos en los que la naturaleza cuántica de los fotones puede cambiar drásticamente las propiedades de los materiales y dar lugar a un nuevo comportamiento colectivo y de los fenómenos. El catedrático Ángel Rubio, del Departamento de Física de Materiales de la UPV/EHU y Director del Departamento de Teoría de la MPSD / UPV/EHU. Para simular este tipo de situaciones en ordenador y teniendo en cuenta que las técnicas de simulación estándar generalmente ignoran a los fotones, el departamento de teoría de la MPSD, dirigido por el profesor Ángel Rubio, ha desarrollado un método teórico novedoso que también incluye la interacción con los fotones. La idea básica es tratar todo el sistema QED de partículas y fotones como un fluido cuántico. En el mismo, las partículas están representadas por una corriente de carga, y los fotones por un campo electromagnético clásico que actúa sobre la corriente de una manera muy compleja. En una reciente publicación en la prestigiosa revista Proceedings of the National Academy of Sciences, los autores han demostrado que esta aproximación puede describir exactamente la dinámica de un electrón que está atrapado en una superficie y que interactúa fuertemente con fotones. La ventaja de esta reformulación

Audiencia: 1.257

Ranking: 4

VPE: 3

Página: 2

Tipología: online

del problema electrón-fotón acoplado es dicen Johannes Flick y Michael Ruggenthaler, que permite realizar aproximaciones que tratan a los fotones y las partículas en igualdad de condiciones. De esta manera, podemos llegar a nuevas técnicas de simulación que no desprecian los fotones y siguen siendo lo suficientemente simples para ser prácticas. Después de esta prueba de concepto, en un siguiente paso, el equipo de Ángel Rubio quiere usar la técnica desarrollada para investigar sistemas complejos en situaciones donde se supone que los fotones juegan un papel importante y, por tanto, conocer cómo se modifican las propiedades de los materiales. Este estudio proporciona una nueva forma de controlar y alterar las reacciones químicas en los sistemas complejos, tales como biomoléculas, y diseñar nuevos estados de materia, indica el catedrático de la UPV/EHU Ángel Rubio. . Referencia bibliográfica: Flick, M. Ruggenthaler, H. Appel, A. Rubio. (2015) Kohn-Sham approach to quantum electrodynamical density-functional theory: Exact time-dependent effective potentials in real space. PNAS vol. 112 no. 50 <http://dx.doi.org/10.1073/pnas.1518224112> .

Un cuanto de luz para la ciencia de materiales

Lunes, 21 de diciembre de 2015

Las simulaciones por ordenador que predicen el cambio inducido por la luz en las propiedades físicas y químicas de los sistemas complejos, moléculas, nanoestructuras y sólidos generalmente ignoran la naturaleza cuántica de la luz. Científicos del Instituto Max-Planck para la estructura y dinámica de la Materia (MPSD), dirigidos por el catedrático Ángel Rubio, del Departamento de Física de Materiales de la UPV/EHU y Director del Departamento de Teoría de la MPSD, han demostrado cómo pueden incluirse adecuadamente los efectos de los fotones en estos cálculos. Este estudio abre la posibilidad de predecir y controlar el cambio de las propiedades de los materiales debido a la interacción con los fotones desde los principios fundamentales. Los elementos básicos de los átomos, moléculas y sólidos son los núcleos, con carga positiva, y los electrones, cargados negativamente. Sus interacciones mutuas determinan la mayoría de las propiedades físicas y químicas de la materia, tales como la conductividad eléctrica o la absorción de la luz. Las leyes que rigen esta delicada interacción entre los electrones y los núcleos son las pertenecientes a la electrodinámica cuántica (QED), en la que las partículas interactúan mediante el intercambio de fotones, que son los cuantos de luz. Sin embargo, las ecuaciones de la QED son tan complejas que en la práctica los científicos tienen que simplificarlas para ser capaces de hacer cualquier predicción de materiales reales. Una simplificación muy común en química cuántica y física del estado sólido es despreciar la naturaleza cuántica de la luz. Aunque esta aceptación funciona bien para muchas aplicaciones, experimentos recientes han descubierto casos en los que la naturaleza cuántica de los fotones puede cambiar drásticamente las propiedades de los materiales y dar lugar a un nuevo comportamiento colectivo y de los fenómenos. Para simular este tipo de situaciones en ordenador y teniendo en cuenta que las técnicas de simulación estándar generalmente ignoran a los fotones, el departamento de teoría de la MPSD, dirigido por el profesor Ángel Rubio, ha desarrollado un método teórico novedoso que también incluye la interacción con los fotones. La idea básica es tratar todo el sistema QED de partículas y fotones como un fluido cuántico. En el mismo, las partículas están representadas por una corriente de carga, y los fotones por un campo electromagnético clásico que actúa sobre la corriente de una manera muy compleja. En una reciente publicación en la prestigiosa revista Proceedings of the National Academy of Sciences, los autores han demostrado que esta aproximación puede describir exactamente la dinámica de un electrón que está atrapado en una superficie y que interactúa fuertemente con fotones. "La ventaja de esta reformulación del problema electrón-fotón acoplado es dicen Johannes Flick y Michael Ruggenthaler, que permite realizar aproximaciones que tratan a los fotones y las partículas en igualdad de condiciones. De esta manera, podemos llegar a nuevas técnicas de simulación que no desprecian los fotones y siguen siendo lo suficientemente simples para ser prácticas". Después de esta prueba de concepto, en un siguiente paso, el equipo de Ángel Rubio quiere usar la técnica desarrollada para investigar sistemas complejos

Audiencia: 8.423

Ranking: 5

VPE: 86

Página: 2

Tipología: online

en situaciones donde se supone que los fotones juegan un papel importante y, por tanto, conocer cómo se modifican las propiedades de los materiales. "Este estudio proporciona una nueva forma de controlar y alterar las reacciones químicas en los sistemas complejos, tales como biomoléculas, y diseñar nuevos estados de materia", indica el catedrático de la UPV/EHU Ángel Rubio. Referencia bibliográfica J. Flick, M. Ruggenthaler, H. Appel, A. Rubio. (2015) Kohn-Sham approach to quantum electrodynamical density-functional theory: Exact time-dependent effective potentials in real space. PNAS vol. 112 no. 50 <http://dx.doi.org/10.1073/pnas.1518224112> Foto: UPV/EHU

MATERIALS EVOLUTION gana el XV Premio Manuel Laborde

Lunes, 21 de diciembre de 2015

La iniciativa Materials Evolution presentada por Yann Pouillon, Federico Iori y Ángel Rubio -vinculados al grupo de investigación Nano-Bio Spectroscopy Group de la UPV/EHU- ha sido galardonada con el primer premio Manuel Laborde Werlinden, en su décimo quinta edición, a la mejor iniciativa empresarial con base tecnológica basada en ideas innovadoras. El proyecto presentado consiste en un servicio que, a través de potentes métodos de simulación, consiguen la modelización de la materia. Ello permite acelerar de forma sustancial los procesos de descubrimiento y síntesis industrial de nuevos materiales. Así mismo, ha recibido el 2º Premio , con una dotación económica 3.000 €, la iniciativa IdOMICS BIOTECH , presentado por Uxune Etxeberria, por una iniciativa que es capaz de utilizar la metabolómica para identificar y caracterizar productos agroalimentarios, lo cual representa un valor añadido para la seguridad y fiabilidad en su consumo. Además, las propuestas innovadoras y/o de base tecnológica podrán optar a las ayudas gestionadas por BIC GIPUZKOA BERRILAN y articuladas por el Departamento Foral de Promoción Económica, Medio Rural y Equilibrio Territorial de Gipuzkoa y por SPRI, dependiente de Gobierno Vasco-Eusko Jaurlaritza. Estas ayudas podrán alcanzar la suma de 60.000 euros, dependiendo del grado de innovación e interés de los proyectos. Esta décimo quinta edición del Premio Manuel Laborde Werlinden se promueve dentro del marco del Programa ENTREPRENARI, desarrollado y gestionado por la UPV/EHU (Campus de Gipuzkoa) y el Centro Europeo de Empresas e Innovación Bic Gipuzkoa Berrilan, y cuyo objetivo es el fomento, asesoramiento y apoyo a los emprendedores, y a la creación de empresas innovadoras en el Campus de Gipuzkoa de la UPV/EHU. El Premio está dirigido al personal docente e investigador de la UPV/EHU; a empresas que deciden explotar los resultados de una investigación realizada en colaboración con la UPV/EHU, a través de la creación de una nueva empresa; y a titulados, postgraduados o alumnado de último curso de la UPV/EHU. El Premio tiene como objetivos principales: Fomentar ideas y proyectos de emprendizaje en el entorno universitario. Apoyar y difundir la cultura empresarial en el colectivo universitario. Aprovechar el potencial innovador de la Universidad para la creación y desarrollo de nuevas empresas. Favorecer nuevas fórmulas de apoyo al empleo en nuestro entorno. Un total de trece proyectos optaban al galardón a la mejor iniciativa empresarial basada en una idea innovadora. En el acto de entrega de los premios han participado Ana Arrieta, vicerrectora del Campus de Gipuzkoa de la UPV/EHU; Ainhoa Aizpuru, diputada de Promoción Económica, Medio Rural y Equilibrio Territorial de la Diputación Foral de Gipuzkoa; Aitor Urzelai, director de Emprendimiento, Innovación y Sociedad de la Información, Desarrollo Económico y Competitividad de Gobierno Vasco; y Marisa Arriola, directora gerente de Bic Gipuzkoa Berrilan. Durante el acto el profesor Luis M. Liz-Marzán, director científico de CIC biomaGUNE, ha impartido la ponencia titulada 'Investigación en biomateriales y beneficio social. Perspectiva desde CIC biomaGUNE'. En el mismo acto, se han entregado los Premios THINK BIG 2015,

Audiencia: 8.423

Ranking: 5

VPE: 86

Página: 2

Tipología: online

edición Gipuzkoa: 1er Premio , dotado con 2.500 €, a la iniciativa INDIE TOTEM', plataforma on-line de promoción y comercialización de videojuegos independientes para Pc, presentado por Xabier Linazisoro procedente del Grado de Ingeniería Informática. 2º Premio , dotado con 1.500 €, a la iniciativa Eskalada ergonomía hobetxeko inder neurgailua: Sistema Bindar de apoyo para la escalada' , presentado por Iñigo Mugica y Sever Iruretagoiena procedentes del Grado de Ingeniería Mecánica y del Grado en Ciencias de la Actividad Física y el Deporte. Foto: UPV/EHU

A quantum of light for material science

Miércoles, 23 de diciembre de 2015

University of the Basque Country Computer simulations that predict the light-induced change in the physical and chemical properties of complex systems, molecules, nanostructures and solids usually ignore the quantum nature of light. Scientists at the Max-Planck Institute for the Structure and Dynamics of Matter (MPSD), led by Professor Ángel Rubio of the UPV/EHUs Department of Material Physics and Director of the Theory Department at the MPSD, have now shown how the effects of the photons can be properly included in such calculations. This study opens up the possibility of predicting and controlling the change of material properties due to the interaction with photons from first principles. The basic building blocks of atoms, molecules and solids are positively charged nuclei and negatively charged electrons. Their mutual interactions determine most of the physical and chemical properties of matter, such as electrical conductivity or the absorption of light. The laws that govern this delicate interplay between electrons and nuclei are those of quantum electrodynamics (QED), in which particles interact via the exchange of photons, which are the quanta of light. However, the equations of QED are so complex that in practice scientists have to simplify them to be able to make any prediction for real materials. A very common simplification in quantum chemistry and solid-state physics is to neglect the quantum nature of light. Although this assumption works well for many applications, recent experiments have uncovered situations where the quantum nature of the photons can dramatically change the material properties and give rise to new collective behaviour and phenomena. In order to simulate such situations on a computer and bearing in mind that the standard simulation techniques usually neglect the photons, the theory department of the MPSD, headed by Prof Angel Rubio, has developed a novel theoretical method that also includes the interaction with photons. The basic idea is to treat the whole QED system of particles and photons as a quantum fluid. Here the particles are represented by a charge current, and the photons by a classical electromagnetic field that acts on the current in a very complex manner. In a recent publication in the prestigious journal Proceedings of the National Academy of Sciences, the authors have shown how this approach can accurately describe the dynamics of an electron that is trapped on a surface and that strongly interacts with photons. The advantage of this reformulation of the coupled electron-photon problem is, said Johannes Flick and Michael Ruggenthaler, lead authors of the work, that it allows approximations that treat photons and particles on an equal footing. In this way we can come up with new simulation techniques that do not neglect the photons while still being simple enough to be practical." After this proof of principle, in a next step Prof Rubios team wants to use the technique developed to investigate complex systems in situations where photons are assumed to play an important role and hence learn how this modifies the properties of materials. This could provide a new way to control and alter chemical reactions in complex systems such as biomolecules, and to design new states of matter. This study offers a new way of controlling and altering chemical reactions in complex systems,

Audiencia: 13.827

Ranking: 5

VPE: 112

Página: 2

Tipología: online

such as biomolecular ones, and of designing new states of matter, pointed out the UPV/EHU Professor Ángel Rubio. Full bibliographic information J. Flick, M. Ruggenthaler, H. Appel, A. Rubio. (2015) Kohn-Sham approach to quantum electrodynamical density-functional theory: Exact time-dependent effective potentials in real space. PNAS vol. 112 no. 50 <http://dx.doi.org/10.1073/pnas.1518224112>

A quantum of light for material science University of the Basque Country 4m

Miércoles, 23 de diciembre de 2015

EurekaAlert! provides embargoed and breaking science news you can't afford to miss. EurekaAlert! offers a one-stop science news distribution service you can trust. EurekaAlert! is a service of the American Association for the Advancement of Science. A study led by Ángel Rubio, the UPV/EHU-University of the Basque Country professor and head of the Max Planck Institute in Hamburg, shows that it is possible to predict the effects of photons on materials University of the Basque Country **IMAGE:** The charge density of an electron (in blue) changes its form due to the interaction with photons (in red). [view more](#) Credit: © J.M. Harms/MPSD This news release is available in Spanish. The basic building blocks of atoms, molecules and solids are positively charged nuclei and negatively charged electrons. Their mutual interactions determine most of the physical and chemical properties of matter, such as electrical conductivity or the absorption of light. The laws that govern this delicate interplay between electrons and nuclei are those of quantum electrodynamics (QED), in which particles interact via the exchange of photons, which are the quanta of light. However, the equations of QED are so complex that in practice scientists have to simplify them to be able to make any prediction for real materials. A very common simplification in quantum chemistry and solid-state physics is to neglect the quantum nature of light. Although this assumption works well for many applications, recent experiments have uncovered situations where the quantum nature of the photons can dramatically change the material properties and give rise to new collective behaviour and phenomena. In order to simulate such situations on a computer and bearing in mind that the standard simulation techniques usually neglect the photons, the theory department of the MPSD, headed by Prof Angel Rubio, has developed a novel theoretical method that also includes the interaction with photons. The basic idea is to treat the whole QED system of particles and photons as a quantum fluid. Here the particles are represented by a charge current, and the photons by a classical electromagnetic field that acts on the current in a very complex manner. In a recent publication in the prestigious journal Proceedings of the National Academy of Sciences, the authors have shown how this approach can accurately describe the dynamics of an electron that is trapped on a surface and that strongly interacts with photons. "The advantage of this reformulation of the coupled electron-photon problem is," said Johannes Flick and Michael Ruggenthaler, lead authors of the work, "that it allows approximations that treat photons and particles on an equal footing. In this way we can come up with new simulation techniques that do not neglect the photons while still being simple enough to be practical." After this proof of principle, in a next step Prof Rubio's team wants to use the technique developed to investigate complex systems in situations where photons are assumed to play an important role and hence learn how this modifies the properties of materials. This could provide a new way to control and alter chemical reactions in complex systems such as biomolecules, and to design new states of matter. "This study offers a new way of controlling and altering chemical reactions in complex systems,

Audiencia: 181.208

Ranking: 6

VPE: 1.147

Página: 2

Tipología: online

such as biomolecular ones, and of designing new states of matter," pointed out the UPV/EHU Professor Ángel Rubio. Bibliographical references: J. Flick, M. Ruggenthaler, H. Appel, A. Rubio. (2015) Kohn-Sham approach to quantum electrodynamical density-functional theory: Exact time-dependent effective potentials in real space. PNAS vol. 112 no. 50 <http://dx.doi.org/10.1073/pnas.1518224112> Disclaimer: AAAS and EurekAlert! are not responsible for the accuracy of news releases posted to EurekAlert! by contributing institutions or for the use of any information through the EurekAlert system. Media Contact Matxalen Sotillo komunikazioa@ehu.eus 34-688-673-770 @upvehu University of the Basque Country

A quantum of light for material science

Miércoles, 23 de diciembre de 2015

Euskal Herriko Unibertsitatea (via noodls) / Computer simulations that predict the light-induced change in the physical and chemical properties of complex systems, molecules, nanostructures and solids usually ignore the quantum nature of light. Scientists at the Max-Planck Institute for the Structure and Dynamics of Matter (MPSD), led by Professor Ángel Rubio of the UPV/EHU's Department of Material Physics and Director of the Theory Department at the MPSD, have now shown how the effects of the photons can be properly included in such calculations. This study opens up the possibility of predicting and controlling the change of material properties due to the interaction with photons from first principles. The basic building blocks of atoms, molecules and solids are positively charged nuclei and negatively charged electrons. Their mutual interactions determine most of the physical and chemical properties of matter, such as electrical conductivity or the absorption of light. The laws that govern this delicate interplay between electrons and nuclei are those of quantum electrodynamics (QED), in which particles interact via the exchange of photons, which are the quanta of light. However, the equations of QED are so complex that in practice scientists have to simplify them to be able to make any prediction for real materials. A very common simplification in quantum chemistry and solid-state physics is to neglect the quantum nature of light. Although this assumption works well for many applications, recent experiments have uncovered situations where the quantum nature of the photons can dramatically change the material properties and give rise to new collective behaviour and phenomena. In order to simulate such situations on a computer and bearing in mind that the standard simulation techniques usually neglect the photons, the theory department of the MPSD, headed by Prof Angel Rubio, has developed a novel theoretical method that also includes the interaction with photons. The basic idea is to treat the whole QED system of particles and photons as a quantum fluid. Here the particles are represented by a charge current, and the photons by a classical electromagnetic field that acts on the current in a very complex manner. In a recent publication in the prestigious journal Proceedings of the National Academy of Sciences, the authors have shown how this approach can accurately describe the dynamics of an electron that is trapped on a surface and that strongly interacts with photons. 'The advantage of this reformulation of the coupled electron-photon problem is,' said Johannes Flick and Michael Ruggenthaler, lead authors of the work, 'that it allows approximations that treat photons and particles on an equal footing. In this way we can come up with new simulation techniques that do not neglect the photons while still being simple enough to be practical.' After this proof of principle, in a next step Prof Rubio's team wants to use the technique developed to investigate complex systems in situations where photons are assumed to play an important role and hence learn how this modifies the properties of materials. This could provide a new way to control and alter chemical reactions in complex systems such as biomolecules, and to design new states of matter. 'This study offers a new way of controlling

Audiencia: 26.607

Ranking: 5

VPE: 112

Página: 2

Tipología: online

and altering chemical reactions in complex systems, such as biomolecular ones, and of designing new states of matter,' pointed out the UPV/EHU Professor Ángel Rubio. Bibliographical references J. Flick, M. Ruggenthaler, H. Appel, A. Rubio. (2015) Kohn-Sham approach to quantum electrodynamical density-functional theory: Exact time-dependent effective potentials in real space. PNAS vol. 112 no. 50 <http://dx.doi.org/10.1073/pnas.1518224112> Photo: UPV/EHU

A quantum of light for material science

Miércoles, 23 de diciembre de 2015

(December 23, 2015) A study led by Ángel Rubio, the UPV/EHU-University of the Basque Country professor and head of the Max Planck Institute in Hamburg, shows that it is possible to predict the effects of photons on materials. Computer simulations that predict the light-induced change in the physical and chemical properties of complex systems, molecules, nanostructures and solids usually ignore the quantum nature of light. Scientists at the Max-Planck Institute for the Structure and Dynamics of Matter (MPSD), led by Professor Ángel Rubio of the UPV/EHU's Department of Material Physics and Director of the Theory Department at the MPSD, have now shown how the effects of the photons can be properly included in such calculations. This study opens up the possibility of predicting and controlling the change of material properties due to the interaction with photons from first principles. The basic building blocks of atoms, molecules and solids are positively charged nuclei and negatively charged electrons. Their mutual interactions determine most of the physical and chemical properties of matter, such as electrical conductivity or the absorption of light. The laws that govern this delicate interplay between electrons and nuclei are those of quantum electrodynamics (QED), in which particles interact via the exchange of photons, which are the quanta of light. However, the equations of QED are so complex that in practice scientists have to simplify them to be able to make any prediction for real materials. A very common simplification in quantum chemistry and solid-state physics is to neglect the quantum nature of light. Although this assumption works well for many applications, recent experiments have uncovered situations where the quantum nature of the photons can dramatically change the material properties and give rise to new collective behaviour and phenomena. [read entire press release >>](#) [journal reference \(Open Access\) >>](#)

Cuántica de la luz en la ciencia de materiales

Jueves, 24 de diciembre de 2015

Referencia: Alpha Galileo.org , 23 de diciembre 2015*****Las simulaciones por ordenador que predicen el cambio inducido por la luz en las propiedades físico-químicas de los sistemas complejos, las moléculas, las nanoestructuras y los sólidos, por lo general, ignoran la naturaleza cuántica de la luz. La densidad de carga de un electrón (en azul)cambia su forma debido a la interacción con los fotones (en rojo). © J.M. Harms/MPSD Los científicos del Instituto Max-Planck para la Estructura y Dinámica de la Materia (MPSD), dirigido por el profesor Ángel Rubio, de IUPV/EHUs Department of Material Physics y director de su Departamento teórico, han mostrado cómo los efectos de la fotones pueden ser adecuadamente incluidos en estos cálculos. Este estudio abre la posibilidad de predecir y controlar el cambio de las propiedades de un material debido a la interacción con los fotones de sus comienzos. Los bloques de construcción básicos de los átomos, moléculas y sólidos, son núcleos cargados positivamente y electrones cargados negativamente. Sus interacciones mutuas determinan la mayor parte de las propiedades físicas y químicas de la materia, como la conductividad eléctrica o la absorción de la luz. Las leyes que rigen esta delicada interacción entre los electrones y los núcleos son la electrodinámica cuántica (QED), donde las partículas interactúan a través del intercambio de fotones, que son los cuantos de luz. Sin embargo, las ecuaciones de QED son tan complejas que, en la práctica, los científicos tienen que simplificarlas para ser capaces de hacer cualquier predicción con los materiales reales. Una simplificación muy común en la química cuántica y en la física de estado sólido es descuidar la naturaleza cuántica de la luz. Aunque este supuesto funciona bien para muchas aplicaciones, en experimentos recientes han descubierto casos en los que la naturaleza cuántica de los fotones puede cambiar drásticamente las propiedades de los materiales dando lugar a nuevos comportamientos colectivos y fenómenos. Para simular este tipo de situaciones en un ordenador, y teniendo en cuenta que las técnicas estándar de simulación generalmente descuidan los fotones, el departamento de teoría de MPSD, encabezado por el profesor Ángel Rubio, ha desarrollado un método teórico novedoso que incluye la interacción con los fotones. La idea básica es tratar a el sistema completo QED de partículas y fotones como un fluido cuántico. Aquí las partículas están representadas por una corriente de carga, y los fotones por un campo electromagnético clásico que actúa sobre la corriente de manera muy compleja. En una reciente publicación en el journal Proceedings of the National Academy of Sciences, los autores han demostrado que este enfoque puede describir con precisión la dinámica de un electrón atrapado en una superficie y que interactúa fuertemente con los fotones. "La ventaja de esta reformulación del problema de acoplamiento electrón-fotón", señalaba Johannes Flick y Michael Ruggenthaler, autores principales del trabajo, permite aproximaciones que tratan a fotones y partículas en pie de igualdad. De esta forma podemos llegar a nuevas técnicas de simulación que no descuidan los fotones sin dejar de ser lo suficientemente simples para ser

Audiencia: 84

Ranking: 3

VPE: -

Página: 2

Tipología: blogs

prácticas."Después de esta prueba de principio, en un siguiente paso, el equipo del profesor Rubio quiere utilizar la técnica desarrollada para investigar los sistemas complejos en situaciones donde se supone que los fotones desempeñan un papel importante y, por tanto, aprender cómo esto modifica las propiedades de los materiales. Este estudio ofrece una nueva forma de controlar y alterar las reacciones químicas en los sistemas complejos, como los biomoleculares, y de diseño de nuevos estados de la materia", añadió el profesor Ángel Rubio, de UPV/EHU .*****-Fuente: Universidad del País Vasco .-Publicación: J. Flick, M. Ruggenthaler, H. Appel, A. Rubio. (2015) Kohn-Sham approach to quantum electrodynamical density-functional theory: Exact time-dependent effective potentials in real space. PNAS vol. 112 no. 50 <http://dx.doi.org/10.1073/pnas.1518224112> . Redes Compartir

A quantum of light for material science

Jueves, 31 de diciembre de 2015

The basic building blocks of atoms, molecules and solids are positively charged nuclei and negatively charged electrons. Their mutual interactions determine most of the physical and chemical properties of matter, such as electrical conductivity or the absorption of light. The laws that govern this delicate interplay between electrons and nuclei are those of quantum electrodynamics (QED), in which particles interact via the exchange of photons, which are the quanta of light. However, the equations of QED are so complex that in practice scientists have to simplify them to be able to make any prediction for real materials. A very common simplification in quantum chemistry and solid-state physics is to neglect the quantum nature of light. Although this assumption works well for many applications, recent experiments have uncovered situations where the quantum nature of the photons can dramatically change the material properties and give rise to new collective behaviour and phenomena. In order to simulate such situations on a computer and bearing in mind that the standard simulation techniques usually neglect the photons, the theory department of the MPD, headed by Prof Angel Rubio, has developed a novel theoretical method that also includes the interaction with photons. The basic idea is to treat the whole QED system of particles and photons as a quantum fluid. Here the particles are represented by a charge current, and the photons by a classical electromagnetic field that acts on the current in a very complex manner. In a recent publication in the prestigious journal Proceedings of the National Academy of Sciences, the authors have shown how this approach can accurately describe the dynamics of an electron that is trapped on a surface and that strongly interacts with photons. "The advantage of this reformulation of the coupled electron-photon problem is," said Johannes Flick and Michael Ruggenthaler, lead authors of the work, "that it allows approximations that treat photons and particles on an equal footing. In this way we can come up with new simulation techniques that do not neglect the photons while still being simple enough to be practical." After this proof of principle, in a next step Prof Rubio's team wants to use the technique developed to investigate complex systems in situations where photons are assumed to play an important role and hence learn how this modifies the properties of materials. This could provide a new way to control and alter chemical reactions in complex systems such as biomolecules, and to design new states of matter. "This study offers a new way of controlling and altering chemical reactions in complex systems, such as biomolecular ones, and of designing new states of matter," pointed out the UPV/EHU Professor Angel Rubio. J. Flick, M. Ruggenthaler, H. Appel, A. Rubio. (2015) Kohn-Sham approach to quantum electrodynamical density-functional theory: Exact time-dependent effective potentials in real space . PNAS vol. 112 no. 5