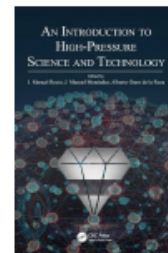


XIII ESCUELA ALTAS PRESIONES

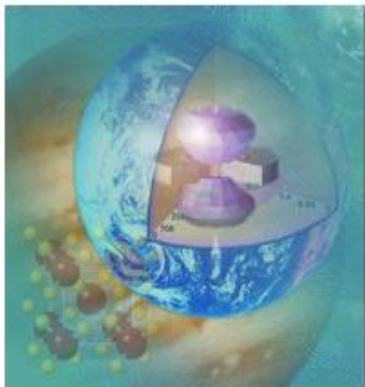
MATERIA BAJO CONDICIONES EXTREMAS



WORKSHOP MATERIA EN CONDICIONES EXTREMAS. XIII ESCUELA ALTAS PRESIONES

Horas/Días	Lunes 22 (EPM)	Martes 23 (EPM)	Miércoles 24 (ESMC)	Jueves 25 (EPM)	Viernes 26 (EPM)
09.30-10.30	TE1 GENERAL J. M. Recio UO	TE2 COMPUTACIÓN H. H. H. Osman UO	TE3 INVITADA Bo Chen DIPC	9 h, TE4 IA-ML David Abbasi AI Factory Austria	TE5 ENLACE QUÍMICO A. Lobato UCM
10.30-11.30	EX1 DAC-LH S. Anzellini UV	EX2 ABS C. Martín UC	EX3 X-RAY S. Gallego UPV	10 h, EX4 INVITADA M. Marqués UO	EX5 ESPECTR. VIBRACIONAL V. García Baonza UCM
11.30-12.00	PAUSA CAFÉ				
12.00-13.00	AP1 GEO D. Santamaría UV	AP3 GRANDES INSTAL J. CAMPO CSIC	PLANETARIO J. de Cos, N. Pinilla ICTEA, UO	11.15 h, AP5 ASTRO L. Bonales/O. Prieto CAB	Mesa Redonda MALTA ANTES Y DESPUÉS DEL CONSOLIDER Modera: V. García Baonza (UCM) ENTREGA DIPLOMAS CIERRE
13.00-14.00	AP2 BIO-I L. Otero ICTAN/UPM	AP4 BIO-II J. Saldo UAB		12.15 h, AP6 EOS J. G. Platas ULL	
				13.15 -14.45 GEOTERMIA	
14.00-16.00	COMIDA				
16.00-17.30	Teoría PL1 J. Pellicer	Teoría PL2 J. Manjón (UPV)	CHARLAS GRUPOS/ ESTUDIANTES J. Manjón (UPV)	Teoría PL3 J. Contreras (CNRS)	
17.30-19.30	PL1 DAC1 S. Anzellini (UV) C. Martín (UC)	PL2 DAC2 S. Gallego (UPV)		PL3 COMPUTACIÓN R. Álvarez-Uría (UO) H. H. H. Osman (UO)	
20.00-22.00	VISITA MIERES	POTLUCK	ESPICHA		





PRIMERA ESCUELA ESPAÑOLA DE ALTAS PRESIONES:
FUNDAMENTOS Y TÉCNICAS
1-5 de Julio de 2002
Universidad de Valencia
Campus de Burjassot

PROGRAMA Y RESÚMENES DE LAS CONFERENCIAS
Y
SESIONES PRÁCTICAS

Organizada por:
Servei de Formació Permanent
Departament de Física Aplicada





2002 VALENCIA. I EAP



2004 MADRID. II EAP



2007 BARCELONA. III EAP



2009 SANTANDER. IV EAP. LIBRO



2011 TENERIFE. V EAP



2013 OVIEDO. VI EAP. LIBRO

MALTA



2012-2013



CURSOS DE EXTENSIÓN UNIVERSITARIA

Cursos de EXTENSIÓN UNIVERSITARIA Segundo Cuatrimestre

VI Escuela de Altas Presiones

| 466 |

José Manuel Recio Muñiz

Ruth Álvarez-Uría Franco

De 20 a 24 de mayo de 2013

Oviedo





UNIVERSIDAD DE OVIEDO

ASTURIAS
CAMPIUS DE EXCELENCIA
INTERNACIONAL
(DE FUTURO)

2012-2013



CURSOS DE EXTENSIÓN UNIVERSITARIA

Cursos de EXTENSIÓN UNIVERSITARIA Segundo Cuatrimestre

VI Escuela de Altas Presiones

| 466 |

José Manuel Recio Muñiz

Ruth Álvarez-Uría Franco

De 20 a 24 de mayo de 2013

Oviedo



- ★ 2015 MADRID. VII EAP. 1st IHPS
- ★ 2017 EL ESCORIAL. VIII EAP
- ★ 2019 EL ESCORIAL. IX EAP
- ★ 2020 TENERIFE. X EAP
- ★ 2021 VALENCIA. XI EAP
- ★ 2024 SANTANDER. XII EAP
- ★ 2026 OVIEDO. XIII EAP

Formato de las Escuelas de Altas Presiones

- Participación de todos los grupos de MALTA
- Un/dos conferenciante invitado
- Cinco días
- Sesiones matinales de teoría
- Sesiones vespertinas de prácticas
- Sesiones orales/posters de estudiantes
- Pequeño programa social
- Docencia reglada

WORKSHOP MATERIA EN CONDICIONES EXTREMAS. XIII ESCUELA ALTAS PRESIONES					
Horas/Días	Lunes 22 (EPM)	Martes 23 (EPM)	Miércoles 24 (ESMC)	Jueves 25 (EPM)	Viernes 26 (EPM)
09.30-10.30	TE1 GENERAL J. M. Recio UO	TE2 COMPUTACIÓN H. H. H. Osman UO	TE3 INVITADA Bo Chen DIPC	9 h. TE4 IA-ML D. Abbasi AI Factory Austria	TE5 ENLACE QUÍMICO A. Lobato UCM
10.30-11.30	EX1 DAC-LH S. Anzellini UV	EX2 ABS C. Martín UC	EX3 X-RAY S. Gallego UPV	10 h. EX4 INVITADA M. Marqués UO	EX5 ESPECTR. VIBRACIONAL V. García Baonza UCM
11.30-12.00	PAUSA CAFÉ				
12.00-13.00	AP1 GEO D. Santamaría UV	AP3 GRANDES INSTAL J. CAMPO CSIC	PLANETARIO J. de Cos, N. Pinilla ICTEA, UO	11.15 h. AP5 ASTRO L. Bonales/O. Prieto CAB	Mesa Redonda MALTA ANTES Y DESPUÉS DEL CONSOLIDER Modera: V. García Baonza (UCM) ENTREGA DIPLOMAS CIERRE
13.00-14.00	AP2 BIO-I L. Otero ICTAN/UPM	AP4 BIO-II J. Saldo UAB		12.15 h. AP6 EOS J. G. Platas ULL	
				13.15 -14.45 GEOTERMIA	
14.00-16.00	COMIDA				
16.00-17.30	Teoría PL1 J. Pellicer (UV)	Teoría PL2 J. Manjón (UPV)	CHARLAS GRUPOS/ ESTUDIANTES J. Manjón (UPV)	Teoría PL3 J. Contreras (CNRS)	
17.30-19.30	PL1 DAC1 S. Anzellini (UV) C. Martín (UC)	PL2 DAC2 S. Gallego (UPV)		PL3 COMPUTACIÓN R. Álvarez-Uría (UO) H. H. H. Osman (UO)	
20.00-22.00	VISITA MIERES	POTLUCK	ESPICHA		

MATERIA EN CONDICIONES EXTREMAS. XIII ESCUELA ALTAS PRESIONES

Teoría y Computación

- General
- Computación
- Átomos bajo presión
- Predicción de estructuras
- Interacciones IA-ML
- Enlace Químico

Técnicas Experimentales

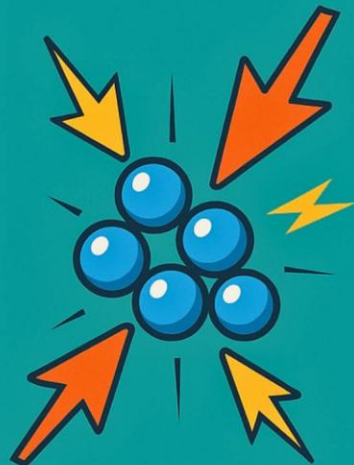
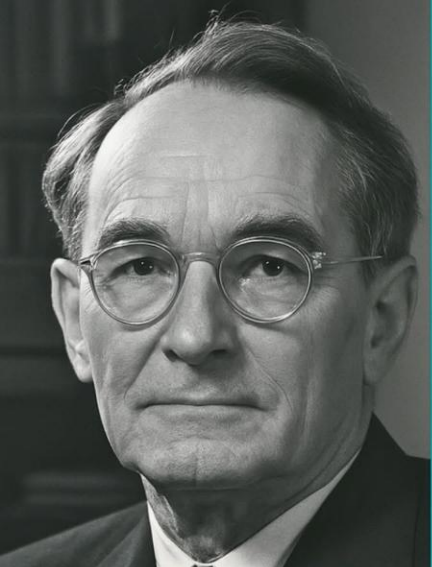
- Celdas: presión y temperatura
- Espectroscopía óptica, SAXS, ...
- Rayos-X
- Espectroscopía vibracional
- Grandes Instalaciones

Aplicaciones

- Alimentos
- Micro-organismos
- Geoquímica
- Astrobiología
- Ecuaciones de Estado

Prácticas

- Celdas de diamante
- Raman
- Cálculos con la densidad electrónica



PERCY W. BRIDGMAN THE PRESSURE MASTER

Born this week in 1882, Bridgman literally pushed Physics to the limit... by squeezing the life out of matter at crazy-high pressures!

Invented equipment to crush stuff with over 100,000atm
Found out how materials behave deep inside planets
Won the 1946 Nobel Prize in Physics

Percy Williams

Bridgman (21/04/1882-20/08/1961) fue un físico y filósofo ganador del **Premio Nobel de Física** en 1946 por su trabajo sobre la física de altas presiones

- Celda de yunque de WC-Precursor de la DAC
 - Record de presión (10 GPa)
- Compresibilidades y propiedades de transporte de más de 100 compuestos
 - Síntesis de diamante

LÍNEAS DE INVESTIGACIÓN EN EL ÁREA DE LAS ALTAS PRESIONES

Materiales

Uso de celdas de yunque de diamante (DAC) para sintetizar materiales superduros, estudiar superconductores a alta temperatura

Planetas

Recreación de las presiones del interior de los planetas: hidrógeno metálico, hielos superiónicos, condiciones de habitabilidad en los océanos profundos de lunas heladas.

Alimentos

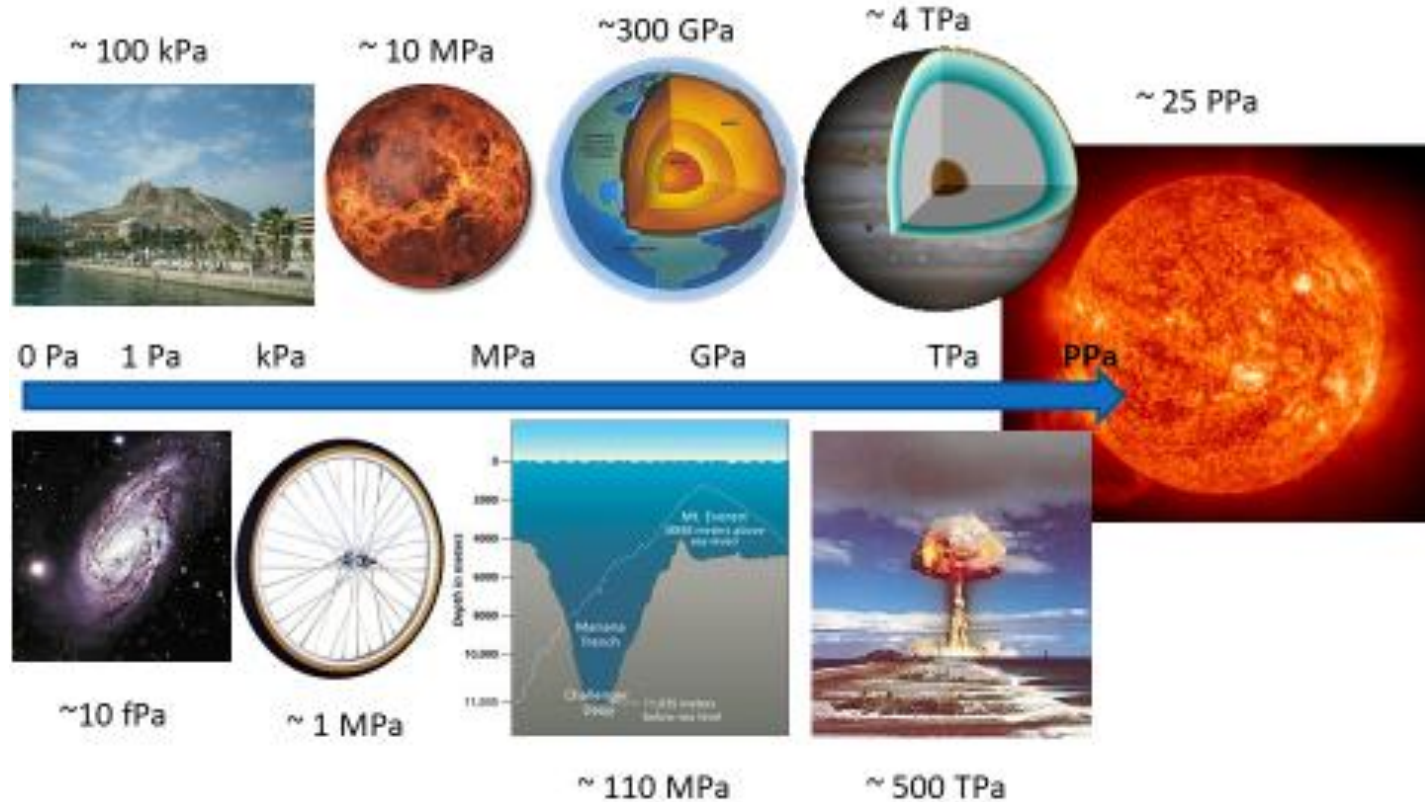
"Pascalizar"/Procesar productos en frío destruyendo patógenos sin modificar sus propiedades nutricionales ni su sabor.

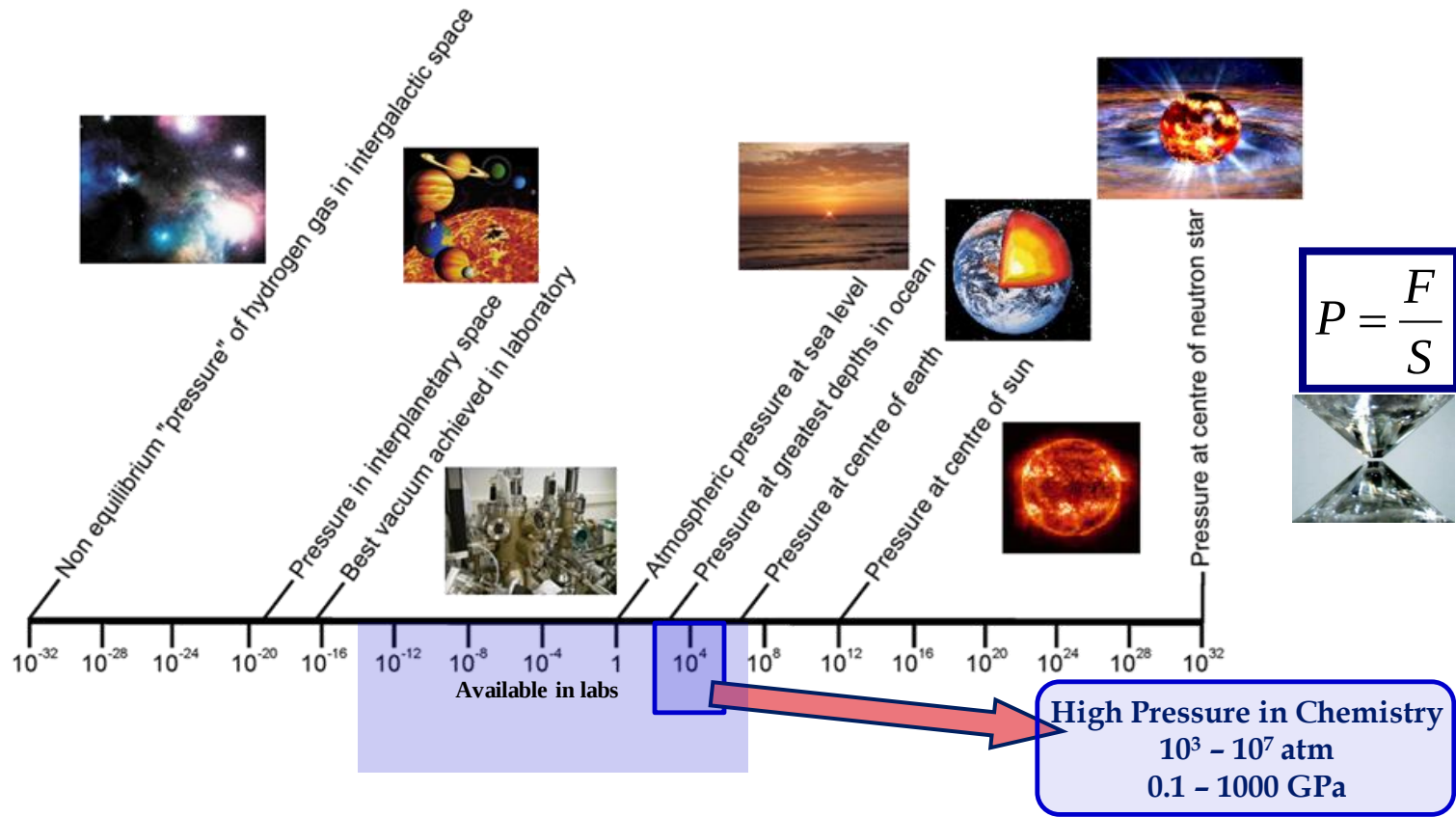
Energía

Aplicación de tecnología de altas presiones para la compresión y almacenamiento de combustibles. Materiales para energía

- 1. High-pressure chemistry at the University of Bern, Switzerland. Doctoral candidate. Structure and chemistry of new barocaloric materials: simple chemical synthesis, single-crystal XRD in DAC and high-pressure DSC. 4 years**
- 2. Postdoctoral positions at Carnegie Mellon University in Qatar. Studies under extreme conditions of low temperature, high magnetic field and especially high pressure. The appointment is up to 3 years, located in Doha, Qatar.**
- 3. PhD opportunity based at the University of Birmingham and collaborating with Diamond, ISIS, and CLF at Harwell for undergraduate and master's students. Dynamic compression for in-situ characterisations.**
- 4. Strong candidates to apply for the MSCA Postdoctoral Fellowships 2026 at Sorbonne University (IMPMC, Paris) in the field of high-pressure physics, crystal growth and thermodynamics.**
- 5. PhD position at the Centre for Science at Extreme Conditions (CSEC) of the University of Edinburgh. Extreme Conditions Chemistry of Lanthanide and Actinide Metals and Oxides. 4 years**

¿De qué presión me hablas?



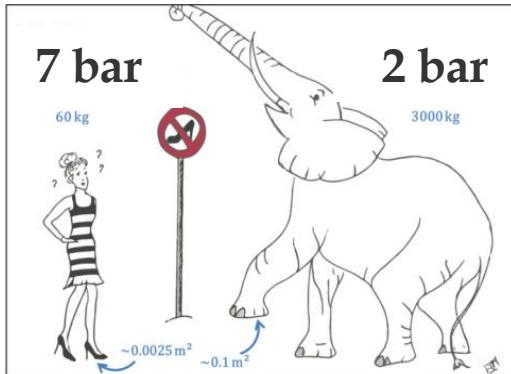
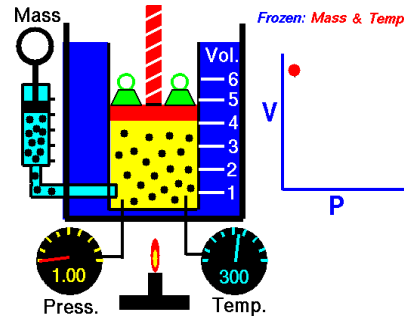


bar	10^3	10^4	10^5	10^6	10^7
kbar	1	10	100	1000	10000
GPa	0.1	1	10	100	1000



Presión Física

$$P = \frac{F}{S} ; [P] = Pa$$

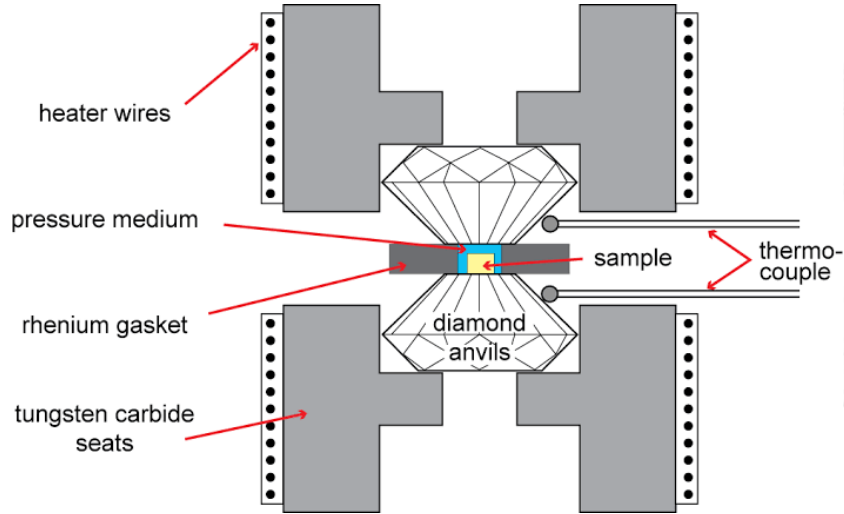


DAC



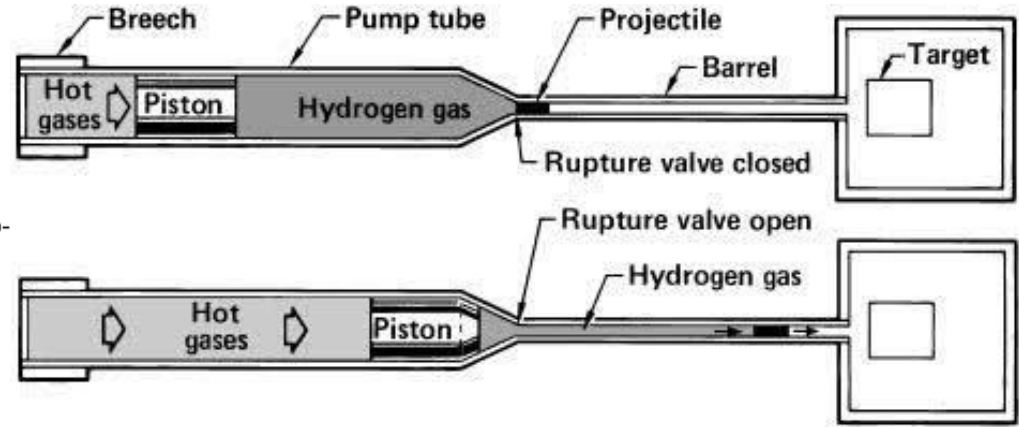
Calibrado:
ruby, NaCl, ...

Compresión Estática: DAC Celdas de gran volumen



EoS isotérmica. ~ 1 TPa.
Horas, días
X-ray, Raman, LH
Europa

Compresión Dinámica: Ondas de Choque



EoS adiabática. ~ 100 TPa
Nanosegundos
VISAR, Emisividad Óptica
USA, Japón

ALGUNOS RETOS DE LAS ALTAS PRESIONES



Material más duro que el diamante: La búsqueda se centra en sintetizar nuevas estructuras cristalinas que superen la dureza del carbono. Principales candidatos: **lonsdaleíta, nitruros de boro, de carbono o de silicio.**



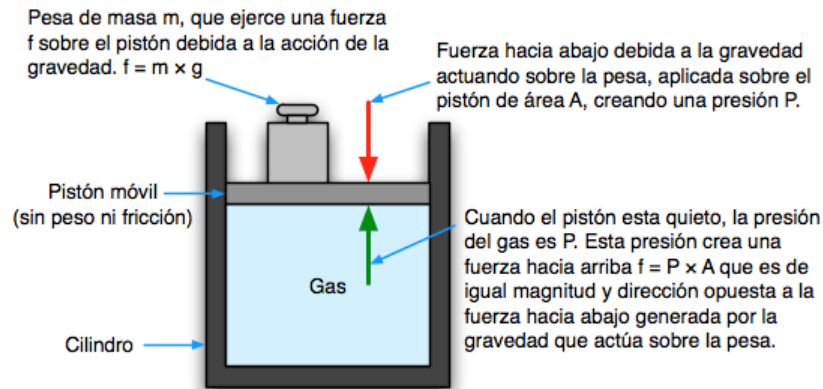
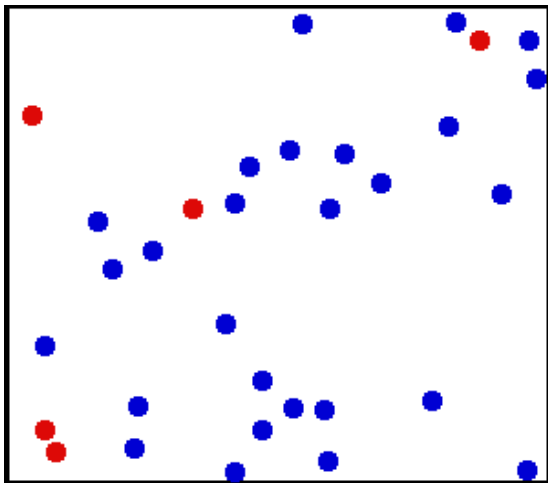
Metalización del hidrógeno: Al someter el hidrógeno a presiones extremas (millones de atmósferas), este elemento pasa de gas a líquido, a sólido diatómico y a una fase sólida monoatómica que podría conducir la electricidad.



Temperatura crítica superconductora: Los récords más recientes se han logrado utilizando hidruros ricos en hidrógeno bajo presiones colosales.

¿QUÉ ES LA PRESIÓN?

La teoría cinético-molecular en los gases proporciona una expresión para la presión en términos de los choques de las moléculas contra las paredes del recipiente que contiene al sistema gaseoso.

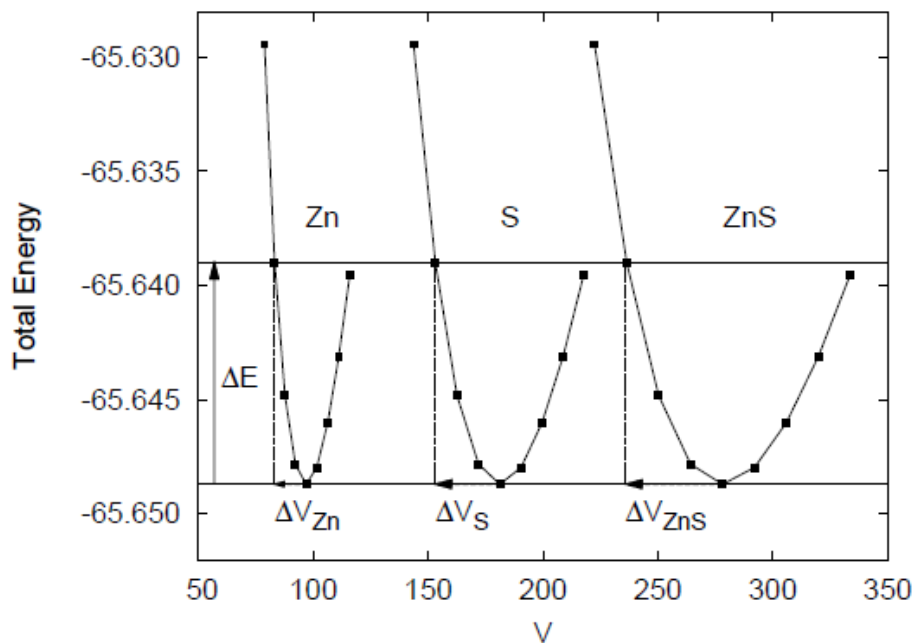


El *valor* de la presión está relacionado con la frecuencia y la *dureza* con las que las moléculas golpean las paredes del recipiente.

La *dureza* del impacto de las moléculas contra las paredes está relacionada con la velocidad y la masa molecular, a través de la cantidad de movimiento.

Presión local: resistencia de un átomo a reducir el volumen

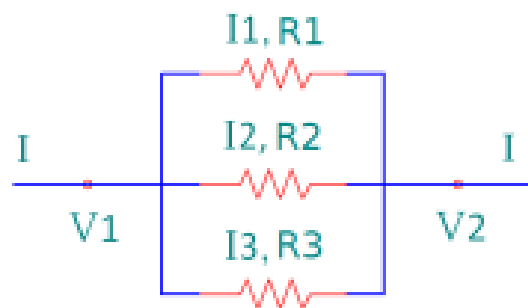
- Para un compuesto binario, AX, $\Delta V = \Delta V_A + \Delta V_X$, y la resistencia mecánica es mayor para cada átomo que para el cristal entero.



$$p_i = - \left(\frac{\partial E}{\partial V_i} \right)_T$$

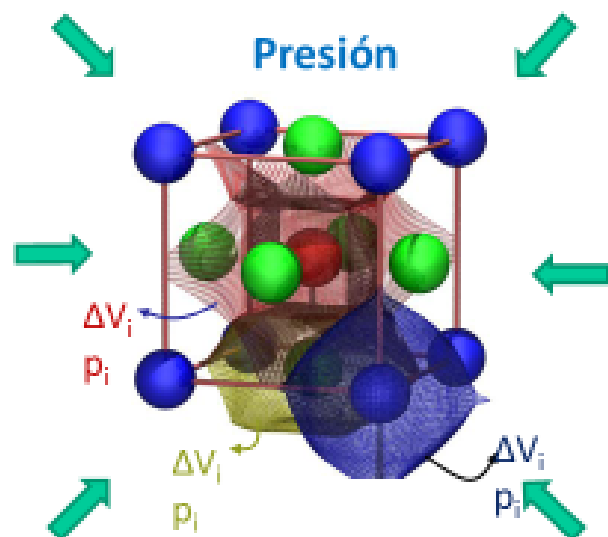


$$\frac{1}{p} = \sum_i \frac{1}{p_i}$$



Resistencia eléctrica en un circuito en paralelo

- $V_2 - V_1 = I R$
- $I = \sum_i I_i$
- $1/R = \sum_i 1/R_i$



Resistencia mecánica en una red cristalina

- $E_2 - E_1 = - \Delta V p$
- $\Delta V = \sum_i \Delta V_i$
- $1/p = \sum_i 1/p_i$



Chemical pressure in functional materials

[Kun Lin](#), [Qiang Li](#), [Runze Yu](#), [Jun Chen](#), [J. Paul Attfield](#), and [Xianran Xing](#)

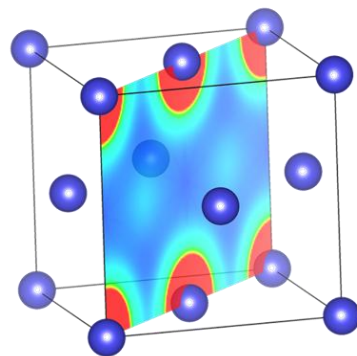
Chemical pressure, a strange but familiar concept, is a lattice internal force caused by lattice strain with chemical modifications.

...
Chemical pressure affects chemical bonding and rationalizes the crystal structure by modifying the electronic structure of solids, regulating the lattice symmetry, local structure, phonon structure effects etc., emerging as a general and effective method for synthesizing new compounds and tuning functional materials.

Presión Química

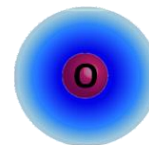
Generalized Stress-Redox Equivalence: A Chemical Link between Pressure and Electronegativity in Inorganic Crystals

Álvaro Lobato, Hussien H. Osman, Miguel A. Salvadó, Pilar Pertierra, Ángel Vegas, Valentín G. Baonza, and J. Manuel Recio

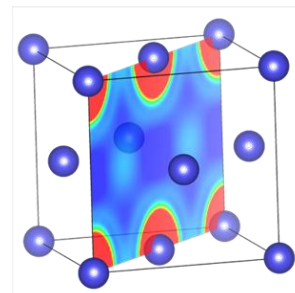


fcc-Ca

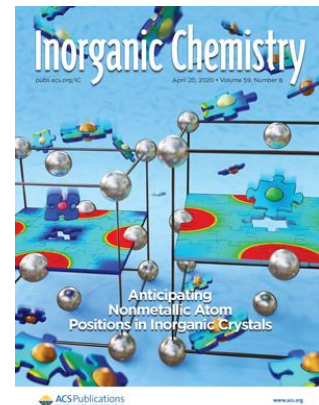
High
Electronegative Atom



Positive Pressure



fcc-Ca@CaO



Pressure-oxidation relationship

Is it possible to mimic physical pressure with chemical doping?

Is it possible to quantify chemical pressure?

Oxygen in CaO equivalent to 12 GPa

Teoría y
Computa-
ción-A

Estructura electrónica. Fundamentos y Metodologías: Ec. Schrödinger, Bandas, HF, DFT, ML-PI, ... **Hussien, TE2 (Martes 9.30 h), David A., TE4 (Jueves 9.00 h)**

Teoría y
Computa-
ción-B

Cristalografía. Predicción de estructuras. **Miriam, EX4 (Jueves 10.00 h)**

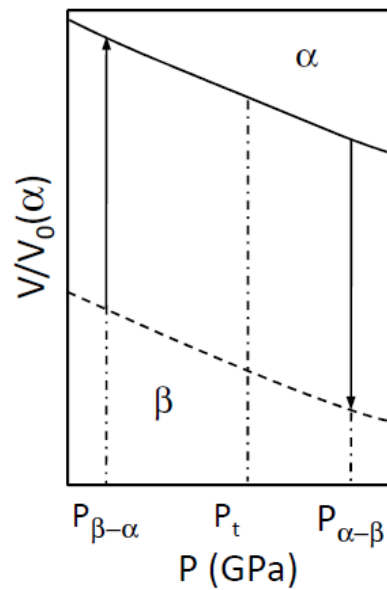
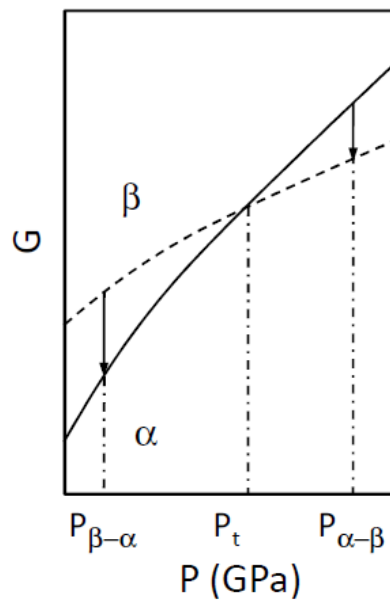
Teoría y
Computa-
ción-C

Termodinámica de Sólidos y Espectroscopía: Fonones, IR, Raman, ... **Michi, TE1 (Lunes 9.30 h)**

Teoría y
Computa-
ción-D

Análisis de la función de onda: densidad electrónica, ELF, NCI, COHP, ... **Álvaro, TE5 (viernes 9.30 h), Julia, PL3 (Jueves 16 h)**

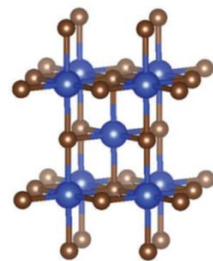
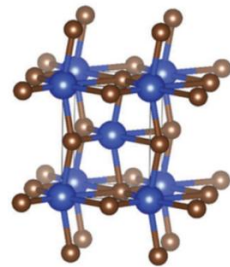
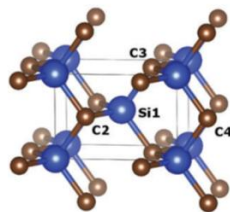
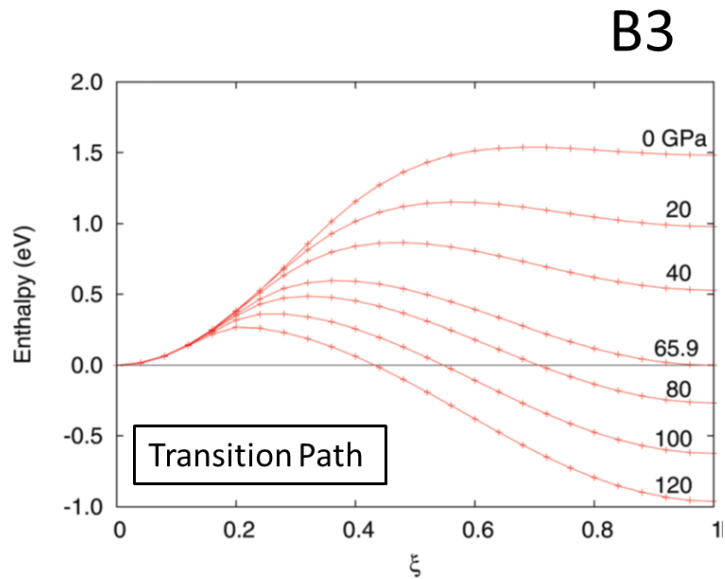
Transiciones de fase inducidas por presión



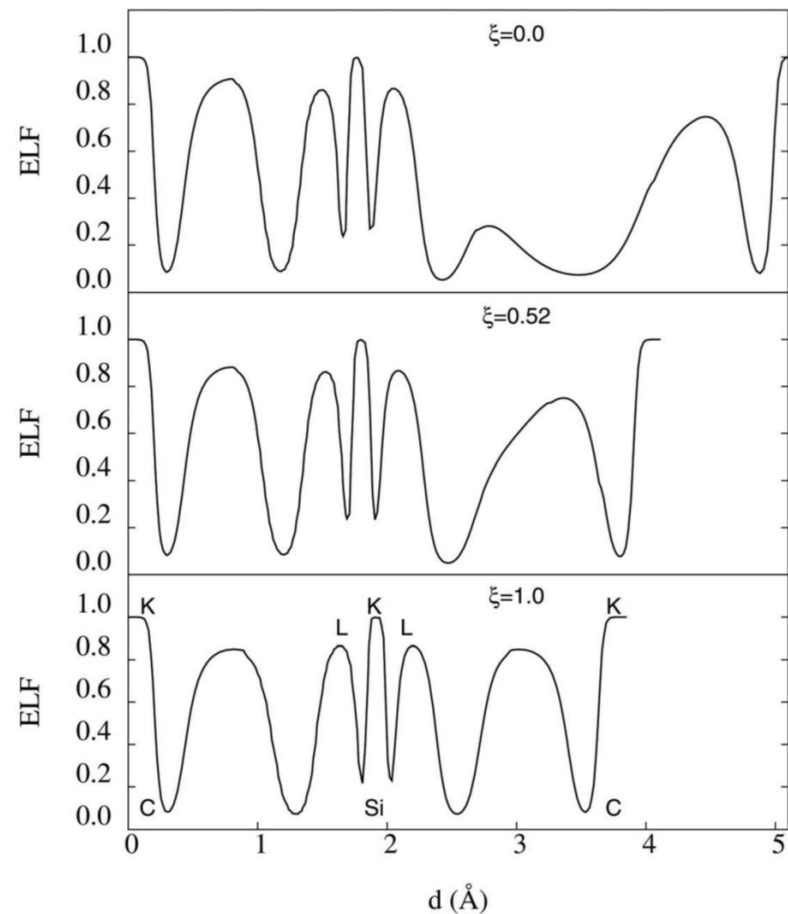
- B3 (ZnS) $\leftrightarrow$ B1 (NaCl)
- B1 (NaCl) $\leftrightarrow$ B2 (CsCl)
- α -Cristobalita $\leftrightarrow$ stishovita
- Zircon $\leftrightarrow$ Reidite

- $\bar{G} = \mu = \bar{H} - T\bar{S}$; $T=0$, $E_{\text{vib},0}=0$; $\mu \simeq E_{\text{ele}} + PV$
- p increases $\rightarrow \left(\frac{\partial G}{\partial p}\right)_T = V > 0$, G increases.
- p increases $\rightarrow V = \left(\frac{\partial G}{\partial p}\right)_T$ decreases, $\left(\frac{\partial^2 G}{\partial p^2}\right)_T < 0$.
- Hysteresis: $p_{\alpha \rightarrow \beta} > p_t$ and $p_{\beta \rightarrow \alpha} < p_t$ for pressure-induced transitions.

Mecanismo de la transición B3-B1 en el SiC



B1



- ★ XIII EAP: EPM (L,M,J,V)-ESMC (X)
- ★ TE-EXP-AP-PL
- ★ BRIDGMAN-PREMIO NOBEL 1946
- ★ ALTAS PRESIONES (0-1000 GPa)
- ★ PRESIÓN FÍSICA Y PRESIÓN QUÍMICA
- ★ TRANS. DE FASE ~ REAC. QUÍMICA

WORKSHOP MATERIA EN CONDICIONES EXTREMAS. XIII ESCUELA ALTAS PRESIONES					
Horas/Días	Lunes 22 (EPM)	Martes 23 (EPM)	Miércoles 24 (ESMC)	Jueves 25 (EPM)	Viernes 26 (EPM)
09.30-10.30	TE1 GENERAL J. M. Recio UO	TE2 COMPUTACIÓN H. H. H. Osman UO	TE3 INVITADA Bo Chen DIPC	9 h. TE4 IA-ML D. Abbasi AI Factory Austria	TE5 ENLACE QUÍMICO A. Lobato UCM
10.30-11.30	EX1 DAC-LH S. Anzellini UV	EX2 ABS C. Martín UC	EX3 X-RAY S. Gallego UPV	10 h. EX4 INVITADA M. Marqués UO	EX5 ESPECTR. VIBRACIONAL V. García Baonza UCM
11.30-12.00	GRACIAS POR LA ATENCIÓN				Mesa Redonda MALTA ANTES Y DESPUÉS DEL CONSOLIDER Modera: V. García Baonza (UCM) ENTREGA DIPLOMAS CIERRE
12.00-13.00					
13.00-14.00					
14.00-16.00					
16.00-17.30	Teoría PL1 J. Pellicer (UV)	Teoría PL2 J. Manjón (UPV)	CHARLAS GRUPOS/ ESTUDIANTES J. Manjón (UPV)	Teoría PL3 J. Contreras (CNRS)	
17.30-19.30	PL1 DAC1 S. Anzellini (UV) C. Martín (UC)	PL2 DAC2 S. Gallego (UPV)		PL3 COMPUTACIÓN R. Álvarez-Uría (UO) H. H. H. Osman (UO)	
20.00-22.00	VISITA MIERES	POTLUCK	ESPICHA		