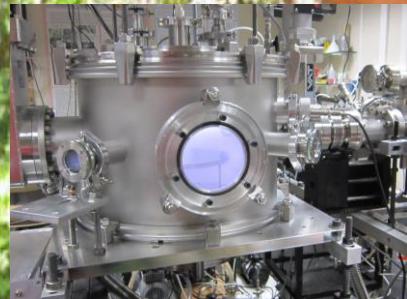
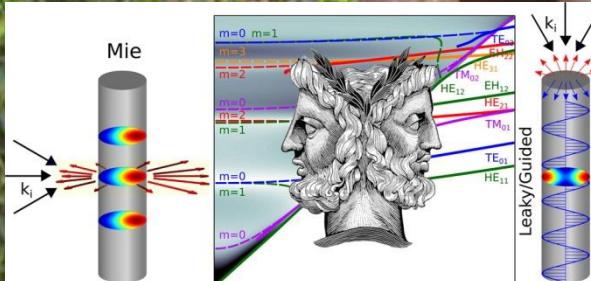
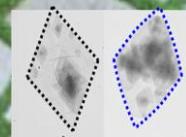
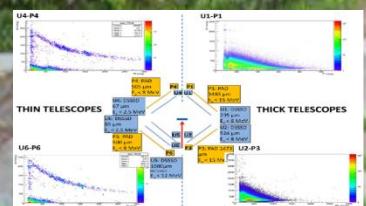
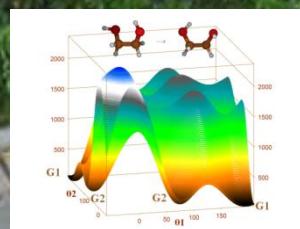


INSTITUTO DE ESTRUCTURA DE LA MATERIA



MEMORIA 2015



CONSEJO SUPERIOR DE INVESTIGACIONES CIENTÍFICAS



GOBIERNO
DE ESPAÑA

MINISTERIO
DE ECONOMÍA
Y COMPETITIVIDAD



CSIC
CONSEJO SUPERIOR DE INVESTIGACIONES CIENTÍFICAS

ANNUAL REPORT 2015

INTRODUCCIÓN

El Instituto de Estructura de la Materia (IEM) es un Instituto de Investigación sólidamente asentado en el CSIC y de gran visibilidad no sólo en él, sino también en España, en Europa y en la comunidad internacional. Con una reputación de excelencia, este Instituto intenta también ser atractivo para estudiantes, investigadores y visitantes.

El IEM fue fundado en 1976, con la unión de algunos investigadores en Física de Partículas, Física Molecular, Química Cuántica y Polímeros Cristalinos. Con la llegada de nuevos científicos y con los cambios experimentados por algunas líneas de investigación, las actividades científicas del IEM han ido incluyendo otras áreas como la Física Nuclear, la Espectroscopía en Nanoestructuras Metálicas o la Gravitación. Durante 2015, las actividades de investigación han estado organizadas alrededor de cuatro Departamentos con grupos experimentales y teóricos cuyos campos científicos abarcan la Física Nuclear, Estadística, Molecular y Macromolecular, la Biofísica, la Física de la Materia Condensada y la Física Gravitacional. Parte de esta investigación utiliza grandes instalaciones nacionales e internacionales. La actividad investigadora se concentra en el área de la Física, aunque con aplicaciones en Química Física y en otras áreas relacionadas.

En 1976, los científicos en plantilla del Instituto eran sólo cinco. En la actualidad, acoge a unos cuarenta y tres investigadores en plantilla distribuidos en los siguientes Departamentos:

Química y Física Teóricas (QFT),
Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados (ENVYMED)
Física Molecular (FM),
Física Macromolecular (FMM).

Desde 1994, el IEM pertenece al Centro de Física Miguel Antonio Catalán (CFMAC). Los Servicios de Biblioteca, Informática, Mantenimiento, Almacén, Proyectos, Taller Mecánico, Taller Óptico y Conserjería son prestados por el CFMAC, y compartidos con los otros Institutos que forman dicho Centro.

La misión del IEM es contribuir al avance del conocimiento en las principales líneas de investigación del Instituto, generar sinergias entre los distintos Grupos de Investigación que lo componen, aprovechando su carácter multidisciplinar y sus enfoques teórico/experimental y de ciencia básica y aplicada, y contribuir a la formación de personal científico en las distintas etapas de la carrera investigadora. La visión del IEM es convertirse en un instituto de referencia en la frontera de la actividad científica representada por la investigación que en él se desarrolla.

Esta actividad científica ha quedado plasmada durante 2015 en 155 publicaciones ISI.

INTRODUCTION

The Institute of Structure of Matter (IEM) aims to be a Research Institute deeply entrenched in the CSIC and highly visible not only there but also in Spain, in Europe and in the international community. With a reputation for excellence, this Institute seeks to also be attractive to students, researchers and visitors.

The IEM was founded in 1976 with the union of some researchers in Particle Physics, Molecular Physics, Quantum Chemistry and Crystalline Polymers. With the advent of new scientists and the changes experienced by some research topics, the scientific activities of IEM have included other areas such as Nuclear Physics, Spectroscopy of Metal Nanostructures and Gravitation. During 2015, research activities have been organized around four Departments with experimental and theoretical groups whose scientific fields include Nuclear Physics, Statistics, Molecular, and Macromolecular Physics, Biophysics, Physics of Condensed Matter, and Gravitational Physics. Part of this research has involved the use of large national and international facilities. The research activity is concentrated in the area of Physics, but with applications in Physical Chemistry and other related fields.

In 1976, scientists at the Institute staff were only five. Currently, IEM hosts around forty three permanent researchers distributed in the following Departments:

Theoretical Chemistry and Physics (QFT)
Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy (ENVYMED)
Molecular Physics (FM)
Macromolecular Physics (FMM)

Since 1994, the IEM is part of the Physics Centre “Miguel Antonio Catalán” (CFMAC). The Library, the Computing, Maintenance, Warehouse and Projects Services, the Mechanical Workshop, the Optical Workshop, and the Receptionists are provided by the CFMAC, and shared with the other Institutes that form the Centre.

The mission of the IEM is to contribute to the advance of knowledge in key research areas of the Institute, to generate synergies between different research groups that compose it, taking advantage of its multidisciplinary nature, together with their theoretical and experimental experience in basic and applied science, and to contribute to the training of scientific personnel in the various stages of the research career. The vision of IEM is to become a reference institution on the frontier of the scientific activity represented by the research that it develops.

This scientific activity, during 2015, has crystallized in 155 ISI publications.

CAPÍTULO 1
ESTRUCTURA DEL INSTITUTO

+

CHAPTER 1
INSTITUTE ORGANIZATION

DIRECCIÓN / DIRECTION

Director / Director: Dr. Guillermo Antonio Mena Marugán

Vicedirector / Assistant Director: Prof. Tiberio Ezquerra Sanz

Vicedirector / Assistant Director: Dr. José M. Fernández Sánchez

Gerente / Manager: Dª. Yolanda Pechero Redondo (until 27th of February 2015)

Gerente / Manager: Dª. Marta Mª Granja Perdices (since 21st of April 2015)

JUNTA DE INSTITUTO / INSTITUTE BOARD

Presidente / President: Dr. Guillermo Antonio Mena Marugán

Secretaria / Secretary: Dª. Yolanda Pechero Redondo (until 27th of February 2015)

Secretaria / Secretary: Dª. Marta Mª Granja Perdices (since 21st of April 2015)

Vocales / Members:

Dr. José Carlos Canalda Cámara

Prof. Tiberio Ezquerra Sanz

Dr. José M. Fernández Sánchez

Prof. José González Carmona

Dr. Rafael Molina Fernández

Dr. Juan Ortigoso Martínez

Dra. Mª del Sagrario Martínez Ramírez

D. Miguel Ángel Moreno Alba

Dr. Santiago Sánchez Cortés

Dr. Juan Francisco Vega Borrego

CLAUSTRO CIENTÍFICO / SCIENTIFIC STAFF

Presidente / President: Dr. Guillermo Antonio Mena Marugán

Secretario / Secretary: Dr. Rafael Molina Fernández

Personal Investigador / Scientific staff:

Dr. Fernando Ania García

Dr. Jesús Fernando Barbero González

Prof. Francisco Javier Bermejo Barrera

Prof. Dionisio Bermejo Plaza

Dr. Carlos Cabrillo García

Dr. Gianluca Calcagni

Dra. Mª Vega Cañamares Arribas

Dr. Pedro Carmona Hernández

Dr. Víctor Cruz Cañas

Dr. Luis Mariano Díaz Sol

Dr. José Luis Doménech Martínez

Prof. Jorge Dukelsky Bercovich

Prof. Rafael Escribano Torres

Prof. Tiberio Ezquerra Sanz

Dr. Ricardo Fernández Perea

Dra. Araceli Flores Aguilar Amat

Dr. José M. Fernández Sánchez

Dr. Óscar Gálvez González

Dra. Mª Cruz García Gutiérrez

Prof. José Vicente García Ramos

Dr. Eduardo Garrido Bellido

Prof. José González Carmona

Prof. Víctor José Herrero Ruiz de Loizaga

Dra. Andrea Jungclaus

Dra. Amelia Linares Dos Santos

Prof. Javier Martínez de Salazar Bascuñana

Dra. Mª del Sagrario Martínez Ramírez

Dr. Raúl Zósimo Martínez Torres
 Dra. Belén Maté Naya
 Dra. Aurora Nogales Ruiz
 Dr. Juan Ortigoso Martínez
 Dr. Francisco Javier Ramos Díaz
 Dr. Daniel Reyes Rueda Bravo
 Dr. Santiago Sánchez Cortés
 Dr. José Antonio Sánchez Gil
 Dr. Julio Francisco Santos Gómez
 Prof. Pedro Sarriguren Suquilbide
 Dra. Mª Luisa Senent Díez
 Dra. Isabel Tararro Onrubia
 Dr. Vicente Timón Salinero
 Dr. Guzmán Tejeda Gala
 Prof. Olof E.I. Tengblad
 Dr. Juan Francisco Vega Borrego

DEPARTAMENTOS DE INVESTIGACIÓN / RESEARCH DEPARTMENTS

DEPARTAMENTO DE QUÍMICA Y FÍSICA TEÓRICAS / THEORETICAL PHYSICS AND CHEMISTRY

Jefe del Departamento / Head of Department:

Dr. José González Carmona

Profesor de Investigación / Research Professor

Personal Científico / Research Staff:

Dr. Pedro Jorge Dukelsky Bercovich
 Dr. Pedro Sarriguren Suquilbide
 Dr. Jesús Fernando Barbero González
 Dr. Eduardo Garrido Bellido
 Dr. Guillermo Antonio Mena Marugán
 Dra. María Luisa Senent Díez
 Dr. Rafael Alejandro Molina Fernández
 Dr. Gianluca Calcagni
 Dr. Jordi Mur Petit

Dra. Rosa Domínguez Gómez
 Dr. Carlos Esebbag Benchimol
 Dr. Luis Javier Garay Elizondo
 Dra. Elvira Moya Valgañón (de Guerra)
 Dª. Samira Dalbouha

D. Enrique Benito Matías
 D. Juan Manuel Boíllos Betete

Dª. Rahma Boussessi
 Dª. Laura Castelló Gomar
 Dª. Beatriz Elizaga de Navascués
 D. Juan Margalef Bentabol
 Dr. Óscar Moreno Díaz
 Dª. Diana Navas Nicolás

D. Alejandro David Somoza Márquez

Profesor de Investigación / Research Professor
 Profesor de Investigación / Research Professor
 Investigador Científico / Research Scientist
 Investigador Científico / Research Scientist
 Investigador Científico / Research Scientist
 Investigadora Científica / Research Scientist
 Científico Titular / Tenured Scientist
 Investigador Contratado RyC / Tenure Track Contract R&C
 Investigador Contratado JAE Doc (hasta 30 de septiembre de 2015) / Postdoc contract JAE Doc (until 30th of September 2015)
 Doctora Vinculada / Adjoint Researcher
 Doctor Vinculado / Adjoint Researcher
 Doctor Vinculado / Adjoint Researcher
 Doctora Vinculada / Adjoint Researcher
 Becaria Predoctoral MAE-AECID (desde 10 de octubre de 2015) / PhD Fellowship MAE-AECIF (since 10th of October 2015)
 Autorización de Permanencia / Authorized Stay
 Autorización de Permanencia (desde 8 de enero de 2015 hasta 8 de abril de 2015) / Authorized Stay (since 8th of January 2015 until 8th of April 2015)
 Autorización de Permanencia / Authorized Stay
 Autorización de Permanencia (hasta 21 de octubre de 2015) / Authorized Stay (until 21st of October 2015)
 Autorización de Permanencia (hasta 9 de marzo de 2015) / Authorized Stay (until 9th of March 2015)

DEPARTAMENTO DE ESPECTROSCOPIA NUCLEAR, VIBRACIONAL Y DE MEDIOS DESORDENADOS / NUCLEAR, VIBRATIONAL AND DISORDERED MEDIA SPECTROSCOPY

Jefe del Departamento / Head of Department:

Dr. Santiago Sánchez Cortés

Investigador Científico / Research Scientist

Personal Científico / Research Staff:

Prof. Javier Bermejo Barrera

Profesor de Investigación / Research Professor

Prof. José V. García Ramos

Profesor de Investigación / Research Professor

Prof. Olof Erik Tengblad

Profesor de Investigación / Research Professor

Dr. Carlos Cabrillo García

Investigador Científico / Research Scientist

Dr. Pedro Carmona Hernández

Investigador Científico / Research Scientist

Dra. Andrea Jungclaus

Investigadora Científica / Research Scientist

Dr. José Antonio Sánchez Gil

Investigador Científico / Research Scientist

Dra. Mª Vega Cañamares Arribas

Científico Titular / Tenured Scientist

Dr. Luis Díaz Sol

Científico Titular / Tenured Scientist

Dr. Ricardo Fernández Perea

Científico Titular / Tenured Scientist

Dra. Sagrario Martínez Ramírez

Científico Titular / Tenured Scientist

Dra. Marina Molina Santos

Doctora Vinculada / Adjoint Researcher

Dra. Paz Sevilla Sierra

Doctora Vinculada / Adjoint Researcher

D. Alejandro Garzón Camacho

Titulado Superior Contratado (hasta 31 de agosto de 2015) / University Graduate (until 31st of August 2015)

D. Eduardo López Tobar

Titulado Superior Contratado / University Graduate

D. Vicente Pesudo Fortes

Titulado Superior Contratado / University Graduate

D. Guillermo Ribeiro Jiménez

Titulado Superior Contratado (hasta 31 de mayo de 2015) / University Graduate (until 31st of May 2015)

D. Diego Romero Abujetas

Titulado Superior Contratado (desde el 24 de marzo hasta el 31 de octubre de 2015) / University Graduate (since 24th of March until 31st of October 2015)

D. Jan Taprogge

Titulado Superior Contratado (hasta el 30 de junio de 2015) / University Graduate (until 30th of June 2015)

D. Adíanez García Leis

Contrato Predoctoral-JAE (hasta 21 de diciembre de 2015) / PhD Fellowship-JAE (until 21st of December 2015)

D. Irene Marroquín Alonso

Contrato Predoctoral FPI/ Predoctoral Contract FPI

D. Víctor Vaquero Soto

Contrato Predoctoral FPI (desde 15 de septiembre de 2015) / Predoctoral Contract FPI (since 15th of September 2015)

D. Mariano Carmona Gallardo

Autorización de Permanencia / Authorized Stay

D.ª. Elisa Corda

Autorización de Permanencia (hasta 30 de noviembre de 2015) / Authorized Stay (until 30th of November 2015)

D.ª. Silvia Dalla Marta

Autorización de Permanencia (desde el 26 de octubre de 2015) / Authorized Stay (since 26th of October 2015)

D. Rafael Jesús Gonçalves Rubira

Autorización de Permanencia / Authorized Stay

D.ª. Rocío Gutierrez Contreras

Autorización de Permanencia (hasta 1 de Julio de 2015) / Authorized Stay (until 1st of July 2015)

D. Andrés Illana Sisón

Autorización de Permanencia / Authorized Stay

D. Moisés Martín Garrido

Autorización de Permanencia / Authorized Stay

D.ª. María Sole Zalaffi

Autorización de Permanencia (desde 4 de mayo hasta 31 de octubre de 2015) / Authorized Stay (since 4 of May until 31st of October 2015)

Personal de apoyo / Support Staff:

Dr. Enrique Nácher González

Técnico Superior Especializado de OPIS / Specialized University Graduate OPIS

D. Ángel Perea Martínez

Técnico Especialista de Grado Medio de OPIS / Specialist Technician OPIS

D.ª. Purificación Corchete Corchete

Ayudante de Investigación de OPIS/ Research Assistant OPIS

DEPARTAMENTO DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS**Jefe del Departamento / Head of Department:**

Dr. Juan Ortigoso Martínez

Científico Titular/ *Tenured Scientist***Personal Científico / Research Staff:**

Prof. Dionisio Bermejo Plaza

Profesor de Investigación / *Research Professor*

Prof. Rafael Escribano Torres

Profesor de Investigación / *Research Professor*

Prof. Víctor José Herrero Ruiz de Loizaga

Profesor de Investigación / *Research Professor*

Prof. Salvador Montero Martín

Profesor de Investigación “ad honorem” / *Research Professor
“ad honorem”*

Dr. José Luis Domenech Martínez

Investigador Científico / *Research Scientist*

Dr. José María Fernández Sánchez

Investigador Científico / *Research Scientist*

Dra. Isabel Tanarro Onrubia

Investigadora Científica / *Research Scientist*

Dr. Raúl Zósimo Martínez Torres

Científico Titular / *Tenured Scientist*

Dra. Belén Maté Naya

Científica Titular / *Tenured Scientist*

Dr. Julio Francisco Santos Gómez

Científico Titular / *Tenured Scientist*

Dr. Guzmán Tejeda Gala

Científico Titular / *Tenured Scientist*

Dr. Vicente Timón Salinero

Científico Titular / *Tenured Scientist*

Dr. Óscar Gálvez González

Postdoctoral RyC / *Tenure Track Contract R&C*

Dra. Elena Moreno Atahonero

Postdoctoral Consolider (hasta 30 de abril de 2015) / *Postdoc Contract Consolider (until 30 of April 2015)*

D. Edgar León Gutiérrez

Titulado Superior Contratado (desde 23 de abril hasta 30 de junio de 2015.) / *University Graduate (since 23rd April until 30th of June 2015)*

Dª Nieves Ruiz Fernández

Titulado Superior Contratado (desde 30 de abril hasta 30 de junio de 2015.) / *University Graduate (since 30th April until 30th of June 2015)*

D. Miguel Jiménez Redondo

Contrato predoctoral FPI (hasta 30 de septiembre de 2015) / *Ph D fellow-FPI (until 30th of September 2015)*

D. Germán Molpeceres de Diego

Contrato Predoctoral FPI (desde 1 de abril de 2015) / *Predoctoral Contract FPI (since 1st of April 2015)*

D. Francisco Colmenero Ruiz

Autorización de Permanencia / *Authorized Stay*

Dª. Teresa Cueto Senra

Autorización de Permanencia / *Authorized Stay***Personal de apoyo / Support Staff:**

D. Miguel Ángel Moreno Alba

Ayudante de Investigación OPI / *Research Assistant OPIs*

D. Ángel González Valdenebro

Ayudante de Investigación OPI / *Research Assistan OPIs***DEPARTAMENTO DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS****Jefe del Departamento / Head of Department:**

Dr. Juan Francisco Vega Borrego

Científico Titular / *Tenured Scientist***Personal Científico / Research Staff:**

Prof. Tiberio A. Ezquerra Sanz

Profesor de Investigación / *Research Professor*

Prof. Javier Martínez de Salazar Bascuñana

Profesor de Investigación / *Research Professor*

Dra. Aurora Nogales Ruíz

Investigador Científico / *Research Scientist*

Dr. Daniel R. Rueda Bravo

Investigador Científico (jubilado 28 de enero de 2015) / *Research Scientist (retired 28th of January 2015)*

Dr. Fernando Ania García

Científico Titular / *Tenured Scientist*

Dra. María José Capitán Aranda

Científico Titular / *Tenured Scientist*

Dr. Victor Cruz Cañas

Científico Titular / *Tenured Scientist*

Dra. Araceli Flores Aguilar-Amat

Científico Titular / *Tenured Scientist*

Dra. Mª Cruz García Gutiérrez

Científico Titular / *Tenured Scientist*

Dra. Amelia Linares Dos Santos

Científico Titular / *Tenured Scientist*

Prof. Francisco José Baltá Calleja

Profesor de Investigación “ad honorem” / *Research Professor “ad honorem”*

Dr. Francisco Javier Ramos Díaz

Investigador Contratado RyC / *Tenure Track Contract R&C*

Dra. Carmen Arribas Arribas

Doctor Vinculado / *Adjoint Researcher*

Dª. Margarita Hernández González

Titulado Superior Contratado (desde el 1 de abril de 2015) /
University Graduate (since 1st of April 2015)

Dª. Jing Cui

Becaria Predoctoral/ *PhD Fellowship*

Dª. Patricia Enrique Jiménez

Contrato Predoctoral FPI (desde 16 de abril de 2015) /
Predoctoral Contract FPI (since 16th of April 2015)

D. Álvaro Rodríguez Rodríguez

Contrato Predoctoral FPI/ *Predoctoral Contract FPI*

D. Joel Fernández Alcázar

Autorización de Permanencia (hasta 15 de junio de 2015) /
Authorized Stay (until 15th of June 2015)

Dª. Laura Genovese

Autorización de Permanencia (hasta 14 de marzo de 2015) /
Authorized Stay (until 14th of March 2015)

D. Adrián Sánchez Fernández

Autorización de Permanencia (hasta 15 de mayo de 2015) /
Authorized Stay (until 15th of May 2015)

Personal de apoyo / Support Staff:

Dr. José Carlos Canalda Cámaras

Técnico Superior Especializado de OPIS / *Specialized University Graduate OPIs*

Dª. María José Malagón Sisto

Ayudante de Investigación de OPIS / *Research Assistant OPIs*

UNIDAD DE GESTIÓN ECONÓMICA-ADMINISTRATIVA / FINANCES AND ADMINISTRATION

Dña. Yolanda Pechero Redondo
Dña. Marta Mª Granja Perdices

Gerente (hasta el 27 de febrero)/*Manager (until 27th of February)*
Gerente en funciones (desde el 21 de abril)/*Manager (since 21st April)*

Dña. Concepción Nieto Serrano

Técnico Aux. Informática Admón del Estado (hasta el 31 de mayo)/
IT Technical Auxiliaries (until 31st of May)

Dña. Purificación Díez Rodríguez

C. General Administrativo de la Admon. del Estado /*General Administration*

Dña. Alicia Fernández Clavero
Dña. Ana María García Arribas
Dña. Carmen García Collado
Dña. Beatriz Gil Sánchez

Ayudante de Investigación de OPIS/*Research Assistant OPIs*
Ayudante de Investigación de OPIS/ *Research Assistant OPIs*
Ayudante de Investigación de OPIS/ *Research Assistant OPIs*
C. General Administrativo de la Administración del Estado /
General Administration

Dña. Susana Esteban Serrano
Dña. Isabel Lombán Botello

Cuerpo Auxiliares Postales y de Telégrafos/*Auxiliary OO.AA.*
Auxiliar OO.AA./*Auxiliary OO.AA.*

SERVICIOS DEL CENTRO DE FÍSICA MIGUEL ANTONIO CATALÁN / CENTRAL SERVICES

ALMACÉN / WAREHOUSE

Dña. Clara Isabel Cardeñosa García

C. General Administrativo de la Administración del Estado/
General Administration

D. José Manuel Segura González

C. Auxiliar de Telecomunicaciones/*Auxiliary Telec.*

BIBLIOTECA / LIBRARY

Dña. Flora Granizo Barrena
Dña. Isabel Delgado Oliva

Técnico Biblioteca y Documentación/*Library and Doc. Specialist*
Técnico Especializado de OPIS (Jubilación 19 de junio de 2015) /
Technical Graduate OPIs (retired 19th of June)

D. Samuel López Márquez

Administrativo de OPIS (Jubilación 14 de mayo) / *Administrative OPIs (retired 14th of May)*

CONSERJERÍA / RECEPTION

D. Eduardo Balbás Utrilla

Ayudante Gestión y Servicios Comunes / *Common Services Assistant*

Dña. Soledad Moreno Zambrano

Ayudante Gestión y Servicios Comunes / *Common Services Assistant*

INFORMÁTICA / INFORMATICS AND COMPUTER SERVICES

D. Luis Fernández Felipe

Técnico Auxiliar Informático de la Administración / *IT Technical Auxiliaries*

D. Francisco Daniel Rincón Fuentes

Técnico Especializado de OPIS / *Technical Specialized OPIS*

MANTENIMIENTO / MAINTENANCE

D. Ignacio López Leal

Contrato INEM (desde 1 de noviembre) /
INEM Contract (since 1st of November)

D. Fernando Pueyo García

Técnico Especialista Grado Medio de OPIS / *Technical Specialist OPIS*

D. Julián Zamorano Triviño

Contrato INEM (desde 1 de noviembre) / *INEM Contract (since 1st of November)*

TALLER MECÁNICO / MECHANICAL WORKSHOP

D. Luis Ángel de Prado Serrano

Ayudante de Investigación de OPIS / *Research Assistant OPIS*

TALLER ÓPTICO / OPTICAL WORKSHOP

D. José Lasvignes Pacheco

Técnico Superior de Actv. Técnicas de Mantenimiento y Profesionales / *Technical and Professional Activities Technician*

CAPÍTULO 2A
LABOR INVESTIGADORA

2A.1 DPTO. DE QUÍMICA Y FÍSICA TEÓRICAS

LÍNEAS DE INVESTIGACIÓN:

- Física Teórica: Gravitación.
- Física Nuclear Teórica: Estructura y Reacciones.
- Teoría de la Materia condensada.
- Física Atómica y Molecular a muy baja temperatura.
- Químico-Física Teórica aplicada a la Astrofísica y al estudio de Nuevos Materiales.

SUBLÍNEAS DE INVESTIGACIÓN:

- Relatividad General Clásica y Cuántica.
- Cosmología cuántica.
- Gravedad y Cosmología Cuántica de Lazos.
- Modelos de gravedad cuántica y geometría multi-fractal.
- Agujeros negros.
- Teoría Cuántica de Campos.
- Física Matemática.
- Combinatoria.
- Procesos electrodébiles en el núcleo.
- Estructura nuclear con métodos autoconsistentes de campo medio correlacionado.
- Técnicas de tres cuerpos en Física Nuclear.
- Reacciones de interés en Astrofísica Nuclear.
- Sistemas mesoscópicos y fuertemente correlacionados.
- Átomos y moléculas en degeneración cuántica o en redes ópticas.
- Modelos integrables cuánticos
- Simulación cuántica y metrología cuántica.
- Transporte cuántico y caos cuántico.
- Espectroscopia teórica de especies moleculares de interés astrofísico y atmosférico.
- Colisiones inelásticas no reactivas a bajas temperaturas.
- Interacciones de Van der Walls en ZIFs.

TÉCNICAS UTILIZADAS:

- Física Teórica y Matemática.
- Formalismo hamiltoniano geométrico.
- Métodos computacionales.
- Métodos de campo medio autoconsistente.
- Métodos numéricos para la resolución de las ecuaciones de Faddeev en el espacio de coordenadas.
- Métodos numéricos para la solución de ecuaciones no lineales acopladas.
- Descripción y cálculo de dimensiones en geometría fractal.
- Desarrollo adiabático en hiperarmónicos esféricos.
- Métodos de control cuántico coherente.
- Métodos ab initio altamente correlacionados.

LABOR INVESTIGADORA:

FÍSICA TEÓRICA: CUANTIZACIÓN

Cosmología cuántica, agujeros negros y fractales

Hemos continuado el desarrollo de la línea de investigación del departamento referente a cuantización de sistemas cosmológicos con inhomogeneidades. En concreto, hemos analizado la aplicación al estudio de perturbaciones cosmológicas del formalismo de cuantización híbrida propuesto por nosotros. Este formalismo establece una jerarquía

en los fenómenos de geometría cuántica, permitiendo la combinación de técnicas de cosmología cuántica con métodos más convencionales de teoría de campos en espaciotiempos curvos. Hemos profundizado en la discusión de cuáles son las consecuencias de la cuantización híbrida en escenarios inflacionarios. Nuestro esquema de cuantización extiende la dinámica cosmológica a una época preinflacionaria en la que uno esperaría que los efectos de gravedad cuántica fueran importantes. Esto permite comparar predicciones teóricas de modelos cuánticos con los datos observaciones extraídos del fondo cósmico de microondas. Cabe destacar que nuestro estudio de un universo homogéneo e isótropo con campo escalar en presencia de perturbaciones se basa en una formulación que está especialmente diseñada para preservar la covariancia de la Relatividad General, pues parametrizamos las perturbaciones en términos de cantidades invariantes gauge, y no hacemos ninguna fijación de gauge a nivel clásico. También hemos proseguido con nuestras investigaciones sobre la cuantización híbrida del modelo de Gowdy, que es inhomogéneo, pero con simetrías en ciertas direcciones, de manera que los grados de libertad local se propagan en un fondo anisótropo. Hemos generalizado la construcción de soluciones aproximadas a la ligadura hamiltoniana, con un contenido material que consiste en un campo escalar. Las soluciones encontradas tienen un comportamiento muy interesante, ya que representan estados que, siendo de forma inherente inhomogéneos, resultan ser soluciones aproximadas de un modelo cosmológico homogéneo e isótropo, con materia dada por cualquier fluido perfecto (por ejemplo de tipo constante cosmológica), y con posibles modificaciones a la geometría, similares a las estudiadas en teorías modificadas de gravedad, como $f(R)$.

Asimismo, con el objetivo de extender a campos fermiónicos los resultados previos de nuestro grupo sobre la unicidad en la cuantización de Fock de campos que se propagan en espaciotiempos curvos, hemos investigado un campo de Dirac en un fondo cosmológico homogéneo e isótropo, con secciones espaciales cuya topología es la de la tres-esfera. Hemos construido una clase de equivalencia de representaciones de Fock que está seleccionada por los criterios de poseer un vacío que es invariante bajo la acción del grupo de isometrías del fondo cosmológico, y por admitir una implementación unitaria de la dinámica cuántica.

Existen varias propuestas para regularizar la singularidad clásica de los agujeros negros de forma que su formación y evaporación no dé lugar a problemas de pérdida de información. Una característica común de todas estas propuestas es que estos agujeros regulares presenten horizontes aparentes longevos. Hemos analizado un esquema de regularización de la singularidad clásica que da lugar a un escenario completamente diferente. En nuestro esquema, el colapso de un objeto estelar da lugar a un rebote genuinamente simétrico en el tiempo, lo que en términos geométricos supone la conexión de una geometría de agujero negro con otra de agujero blanco. La duración del rebote visto desde observadores externos es muy corta. Este escenario ha dado lugar a la búsqueda de nuevas formas de equilibrio estelar. También hemos analizado las implicaciones de la violación del principio de Huygens fuerte en la transmisión de información desde el universo primitivo hasta hoy mediante campos sin masa. Hemos demostrado que hay mucha información que nos llega a través de canales de género tiempo, y no mediados mediante fotones reales.

Las partículas que se mueven en el exterior de una estrella experimentarán en general fricción cuántica causada por la reacción de la radiación Unruh. Existen sin embargo trayectorias que no presentan este. En estas trayectorias, los observadores perciben solo la emisión estelar, sin contribuciones adicionales provenientes del efecto Unruh. Resultan tener la propiedad de que las variaciones del efecto Doppler y de los desplazamientos gravitacionales se compensan. No son geodésicas y su aceleración propia obedece una ley de cuadrado inverso, lo que significa que podría estar generada por radiación estelar saliente. En el caso de un agujero negro que emite radiación de Hawking, esto puede dar lugar a un escenario de flotación.

También hemos analizado el problema de la constante cosmológica, que puede entenderse como un fracaso del principio de desacoplamiento que subyace en las teorías efectivas de campos, de manera que algunas magnitudes en la teoría de baja energía son extremadamente sensibles a las propiedades de alta energía. Siguiendo esta intuición, hemos considerado una modificación mínima de la estructura de la relatividad general que, como teoría efectiva, permite trabajar de forma consistente a bajas energías, es decir, por debajo de la escala de gravedad cuántica. Esta descripción efectiva preserva la fenomenología clásica de la relatividad general y el espectro de partículas del modelo estándar. El precio que debe pagarse es cambiar nuestra visión conceptual y matemática del espaciotiempo.

Una línea independiente de investigación ha sido el desarrollo teórico y experimental de las teorías de espaciotiempos multi-escala, donde la geometría cambia con la escala de manera similar a las de multi-fractales. Hemos estudiado por primera vez el Modelo Estándar de partículas elementales tanto en el caso clásico como en sus aspectos cuánticos. Tras formular la acción fundamental en los sectores electrodébil y fuerte de las teorías con derivadas con peso y de “tipo q”, hemos obtenido por primera vez cotas observacionales sobre las escalas características de la medida geométrica procedentes de la vida media del muón y del efecto Lamb shift en los átomos hidrogénicos.

Además, se ha estudiado la dimensión espectral (que indica el número de dimensiones efectivas percibidas por una partícula de prueba) en gravedades cuánticas con geometrías discretas, incluso espumas de espín, teoría de campos de grupos y gravedad de lazos. Se ha demostrado como la geometría de dichas teorías sea afectada por la estructura discreta y combinatorial de manera que la dimensión del espaciotiempo efectivo emergente de la superposición de estados cinemáticos cuánticos cambia con la escala y, en algunos casos, se puede declarar fractal. Este resultado permite individuar de manera precisa las escalas a partir de donde se puede definir el límite clásico.

Teorías de campos parametrizadas con fronteras e invariancia gauge

Las teorías cuánticas de campos definidas en regiones espaciales acotadas son importantes en varias ramas de la física teórica, que van desde el estudio de los agujeros negros a los sistemas de materia condensada. Una de las características

más destacadas de la relatividad general es su invariancia bajo difeomorfismos, una fuente bien conocida de dificultades conceptuales y un obstáculo serio para su cuantización consistente. Entre las ideas más populares utilizadas para entender el problema de la de invariancia bajo difeomorfismos de las teorías de campos y buscar posibles enfoques que nos acerquen a su resolución es la introducción de los llamados modelos parametrizados en los que los *embeddings* juegan un papel importante como variables de configuración adicionales. Éstos se pueden utilizar para evitar la introducción de foliaciones particulares y de alguna manera permiten sortear algunas de las dificultades relacionadas con el conocido *problema del tiempo*. La interacción entre parametrización, la presencia de fronteras espaciales y las simetrías de gauge es bastante complicada desde el punto de vista matemático y debe ser debidamente analizada con el fin de obtener la formulación hamiltoniana para estos modelos, que sirva para su cuantización. Nuestro grupo se ha concentrado en el estudio de dos tipos particulares de sistemas que de alguna manera han eludido un tratamiento satisfactorio hasta la fecha: el campo electromagnético parametrizado (para el que Kuchař y colaboradores dieron un tratamiento parcial, aunque no completamente satisfactorio) y el campo escalar parametrizado en regiones espaciales acotadas con condiciones de contorno de Dirichlet, Neumann o Robin (considerados por Marolf y colaboradores, pero, de nuevo, sólo parcialmente entendidos). Mediante el recurso a métodos hamiltonianos geométricos hemos sido capaces de obtener una formulación hamiltoniana completa y detallada para estos modelos. La característica más sorprendente e inesperada de esta descripción es la aparición de "sectores" en la hipersuperficie de ligaduras primarias. Estos sectores están asociados con el hecho de que el rango (generalizado) del *pullback* de la forma simpléctica a la superficie de ligaduras no es uniforme. Este fenómeno está relacionado con la aparición de una bifurcación del algoritmo de Dirac (utilizado tradicionalmente para el tratamiento de sistemas mecánicos singulares o con ligaduras). El hecho que los sistemas para los que surge esta bifurcación sean por lo general descartados como "no físicos" es una de las razones por las que no han sido estudiados en detalle y son considerados como patológicos. La circunstancia de que, modelos naturales como los que hemos discutido, muestren este tipo de comportamiento de una manera esencial justifica la necesidad de aproximarse a ellos con nuevas herramientas como las que hemos empleado. La disponibilidad de estas herramientas, puestas a punto con el estudio de los modelos mencionados anteriormente, abre la posibilidad de estudiar sistemas más complicados (relatividad general) y utilizar sus versiones parametrizadas para plantearse y entender algunas de las dificultades a las que actualmente se enfrentan los enfoques más populares para su cuantización. Nuestra esperanza es que seremos capaces de hacer frente a algunas de ellas en el futuro próximo.

FÍSICA NUCLEAR TEÓRICA

Desintegración beta en núcleos deformados

El estudio de las propiedades de desintegración beta en distintas regiones de masa nuclear caracterizadas por estados fundamentales deformados ha sido uno de los grandes objetivos durante el presente año. Se han estudiado por un lado núcleos ricos en neutrones en regiones de masa intermedia que abarcan cadenas isotópicas de Ge, Se, Kr, Sr, Ru, Pd. El principal interés por las propiedades de desintegración de estos núcleos radica en sus implicaciones en la nucleosíntesis estelar. En particular, los núcleos estudiados están involucrados en el proceso astrofísico de captura rápida de neutrones (proceso r). Este proceso está considerado en la actualidad como el mecanismo más importante de producción de elementos pesados ricos en neutrones en el universo y se cree que más de la mitad de los elementos más pesados que el hierro tienen su origen en estos procesos estelares. Sus vidas medias determinan en buena medida tanto las posibles trayectorias de los procesos r y sus bifurcaciones como las respectivas abundancias finales de los distintos núcleos tal y como son observadas en la naturaleza. A pesar del gran esfuerzo experimental para determinar las vidas medias de estos núcleos exóticos y debido a las bajas tasas de producción en el laboratorio para estos núcleos altamente inestables, es aún necesario recurrir a estimaciones teóricas con poder predictivo en gran cantidad de casos. Por otro lado, también hemos estudiado las vidas medias y las distribuciones energéticas de la intensidad Gamow-Teller en núcleos deficitarios en neutrones en la región del plomo (Pt, Hg, Pb). El interés de este estudio se centra en la posibilidad de estudiar efectos que la deformación nuclear traslada a los observables de desintegración para finalmente poder extraer información sobre la estructura y forma nucleares a partir de la observación de cómo el núcleo decae. Este trabajo ha sido utilizado también como soporte teórico para interpretar la desintegración de $^{190,192}\text{Pb}$ medida en CERN/ISOLDE. Por último, durante este año hemos continuado estudiando los procesos de doble desintegración beta con emisión de neutrinos contrastando los resultados teóricos con la información experimental existente tanto para las desintegraciones de cada una de las ramas del proceso como para la vida media del doble proceso observada experimentalmente. El propósito final es calibrar los modelos teóricos para ser utilizados con posterioridad en la descripción del proceso de doble desintegración beta sin emisión de neutrinos, aún no observado, que proporcionaría información única sobre la naturaleza del neutrino y su masa absoluta. El modelo teórico en el que basamos este estudio consiste en la aproximación de fases al azar de cuasipartículas (quasiparticle random phase approximation, QRPA) con campos medios obtenidos autoconsistentemente mediante cálculos deformados de Hartree-Fock con fuerzas de Skyrme y correlaciones de apareamiento. Se incluyen así mismo fuerzas residuales de tipo espín-isospín tanto en el canal partícula-hueco como en el canal partícula-partícula. Las deformaciones correspondientes al núcleo en equilibrio se obtienen autoconsistentemente estudiando las superficies de energía que nos muestran la energía del núcleo para cada posible deformación nuclear.

Funciones de onda de continuo en sistemas de tres cuerpos: Resonancias, modos de desintegración y reacciones

El objetivo principal de nuestro trabajo ha sido el seguir avanzando en el desarrollo de las técnicas para el estudio de sistemas de tres cuerpos y explotar sus posibilidades en diversos campos de la Física Nuclear, profundizando en el estudio de sistemas de tres cuerpos en los que interviene la interacción Coulombiana. Un tratamiento preciso de la función de onda a largas distancias es básico para entender cómo se desintegran las resonancias de núcleos como por ejemplo ^{12}C o ^9Be . También pretendemos estudiar reacciones nucleares a baja energía en las que intervienen este tipo de sistemas. En este punto distinguiremos dos tipos de reacciones, por un lado procesos de captura radiactiva, que juegan un papel muy importante un procesos de nucleosíntesis estelar, y en particular en lo que se refiere al salto de los puntos de espera o “waiting points”, y por otro procesos específicamente nucleares, colisiones tanto entre un sistema de dos partículas y un blanco, como colisiones entre tres partículas, para las cuales, las particularidades de los potenciales adiabáticos asociados al método de expansión adiabática permiten distinguir de manera sencilla entre los distintos canales: elástico, inelástico, ruptura o “breakup”, y reconfiguración o “rearrangement”.

Más concretamente, durante los últimos meses nuestro trabajo se ha centrado fundamentalmente en los siguientes dos aspectos: En primer lugar, en el estudio de la reacción triple alfa y su tasa de producción a temperaturas muy bajas. El hecho de que en estas condiciones las energías relativas involucradas sean también muy bajas, claramente por debajo de la resonancia 0^+ en ^8Be , implica que la descripción secuencial del proceso a través de dicha resonancia no es obvia. De hecho, hemos encontrado que una descripción a través de una captura directa, sin poblar estados de dos cuerpos intermedios, puede dar lugar a un incremento de la tasa de producción de hasta 7 órdenes de magnitud para una temperatura de 10^7 GK. Hemos estudiado también los procesos de bremsstrahlung en ^8Be , cuyo conocimiento es necesario a la hora de extender el estudio de este tipo de emisión gamma a ^{12}C . El segundo de los aspectos investigados se refiere a la descripción de reacciones 1+2 mediante el uso de las dos relaciones integrales desarrolladas recientemente. Hemos encontrado que este método es altamente eficiente para describir procesos por debajo de la energía umbral para la ruptura del blanco. Lógicamente, el siguiente paso ha de ser el investigar la validez del método para describir reacciones por encima de este umbral, que llevan por tanto a la ruptura del blanco. Esto ha sido llevado a cabo recientemente, estudiándose procesos de ruptura en colisiones neutrón-deuterón, y reacciones atómicas entre átomos de ^4He a temperaturas muy bajas, hasta del orden del $\square\text{K}$.

SISTEMAS MESOSCÓPICOS Y FUERTEMENTE CORRELACIONADOS

Transporte cuántico

Los clorosomas son las estructuras recolectoras de luz principales de las bacterias verdes del azufre. Los clorosomas son estructuras autoagregadas de centenares de miles de moléculas de bacterioclorofila. Difieren de otros complejos recolectores de luz en la ausencia de una matriz de proteínas y en su gran tamaño con longitudes de hasta 200 nm. Los clorosomas funcionan usualmente en condiciones de muy baja iluminación y son probablemente las antenas recolectoras de luz más eficientes en la naturaleza. Estas propiedades hacen que el clorosoma sea un candidato potencial para formar dispositivos biomiméticos. Estudiamos el efecto del orden en las propiedades espectrales de clorosomas tubulares de la bacteria *Cf. aurantiacus*. Empleamos un hamiltoniano excitónico de Frenkel con parámetros consistentes con estudios espectrales y estructurales. Analizamos la localización de los excitones y su estadística espectral. Una transición de localización dependiente del tamaño aparece como función de la energía de los excitones. La región de transición coincide con la región de estados más activos ópticamente y la región de transferencia de energía más eficiente.

Moléculas ultrafrías

Hemos efectuado una análisis muy completo de la estadística espectral de las resonancias moleculares del ^{166}Er y del ^{168}Er observadas en experimentos recientes [Frisch et al., Nature, 475 (2014)] con el objetivo de determinar la caoticidad del sistema. Hemos calculados diferentes propiedades estadísticas independientes y comparado con los resultados de teoría de matrices aleatorias (RMT), analizando si son consistentes con la posibilidad de tener resonancias perdidas. El análisis de las fluctuaciones de corto alcance como función del campo magnético implica un incremento suave de la caoticidad hasta valores del campo magnético de unos 30 G.

El parámetro de repulsión decrece para campos magnéticos mayores, un efecto que se puede interpretar como debido a resonancias perdidas. El análisis de las fluctuaciones de largo rango nos permite un análisis más cuantitativo y estimar una fracción de niveles perdidos del 20-25%. Finalmente, el estudio de la distribución de la anchura de resonancias apunta también a la presencia de resonancias perdidas con anchuras menores que la resolución experimental para el campo magnético. Concluimos que medidas adicionales con resolución incrementada son necesarias para dar una respuesta concluyente al problema de las resonancias perdidas y el acuerdo con la RMT. Esperamos que este tipo de análisis con herramientas combinadas se convierta en un estándar para el análisis estadístico de espectros experimentales.

Modelos cuánticos integrables

El modelo elíptico de Gaudin describe sistemas de espín completamente anisotrópicos con interacciones de largo rango. Gaudin demostró que el modelo era integrable, pero la solución exacta fue obtenida posteriormente por medio del ansatz de Bethe algebraico. A pesar de las interesantes características del modelo, este nunca fue utilizado para el estudio de sistemas de interés físico. Nosotros retomamos estos trabajos iniciales, generalizamos el modelo elíptico a sistemas de espín arbitrario, y desarrollamos técnicas numéricas para la solución del sistema de ecuaciones no-lineales acopladas para el estado fundamental y los estados excitados de baja energía. En una primera etapa, estudiamos numéricamente el comportamiento de las raíces de este sistema de ecuaciones para un problema de 3 espines diferentes en los sectores de paridad positiva y negativa. Demostramos en este caso, que el número de soluciones independientes era igual a la dimensión del espacio de Hilbert y por lo tanto la solución exacta es completa. Luego propusimos un Hamiltoniano integrable anisotrópico de espín central (ACS) que modela la interacción de un electrón con un punto cuántico. Consideramos para ello la interacción hiperfina del espín del electrón con los espines nucleares de los átomos del baño, más correcciones quadrupolares. Resolvimos exactamente el modelo ACS para cadenas de espín largas y extrapolamos la energía del estado fundamental al límite termodinámico mostrando que los resultados coinciden con el límite clásico. Estos primeros resultados numéricos abren el camino para aplicaciones numéricas del modelo elíptico a otros sistemas cuánticos de muchos cuerpos.

Semimetales de Dirac y Weyl en tres dimensiones

Hemos continuado con la investigación de los llamados semimetales en tres dimensiones, que son relevantes para la descripción de toda una nueva clase de materiales recientemente descubiertos con la propiedad común de tener una relación de dispersión electrónica lineal en las tres dimensiones espaciales. Esta clase incluye el caso de semimetales de Dirac en tres dimensiones, que tienen puntos de Dirac albergando cada uno de ellos fermiones con las dos posibles quiralidades, así como el caso de los semimetales de Weyl, caracterizados por tener puntos de Weyl de quiralidad bien definida. Estos materiales han despertado gran interés debido a su capacidad para desarrollar estados cuánticos topológicos, que pueden ser la vía para un nuevo paradigma de transporte electrónico sin disipación.

Hemos estudiado en particular la interacción entre luz y materia en los semimetales en tres dimensiones, concentrándonos en la investigación de los efectos de la radiación electromagnética circularmente polarizada en el sistema electrónico. Con tal propósito, hemos aplicado dos métodos diferentes, consistentes por un lado en el uso de la teoría de Floquet para obtener soluciones aproximadas de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo y, por otro lado, en la conversión de dicha ecuación por medio de una transformación unitaria en un problema de autovalores independiente del tiempo. Ambos métodos nos han permitido entender los *gaps* de energía que aparecen en puntos particulares del espectro. Mayor interés todavía tiene la constatación de que la interacción entre radiación y materia conduce a la aparición de estados dentro del *gap*, que tienen el carácter de ondas evanescentes extinguiéndose a partir de la superficie del semimetal expuesta a la radiación.

Hemos establecido una conexión muy llamativa entre los estados evanescentes dentro del *gap* y la existencia de los llamados puntos excepcionales en el hamiltoniano que describe la interacción entre radiación y materia. De hecho, los estados evanescentes de energía cero se pueden entender como puntos de rama del espectro en los que el *gap* se cierra, para momentos dentro del plano complejo. Esto dota a los estados de superficie de un nuevo mecanismo de protección topológica, puesto que los cortes de rama no pueden deshacerse a menos que los puntos de rama se junten a pares. Hemos visto que estos nuevos estados de superficie tienen en general una gran degeneración proporcional al área de la superficie irradiada y a la amplitud del campo de radiación. Esto puede dar lugar al desarrollo de una banda plana de estados localizados, proporcionando una alternativa a la habitual cuantización de Landau en la que el papel del campo magnético es aquí reemplazado por el campo de radiación.

Hemos demostrado que la característica genuina de los estados de superficie dentro del *gap* es el transporte de corriente angular, con la misma quiralidad que la polarización del fotón, llevando una rotación de la carga que está sincronizada con la del campo de radiación. Esto debe conducir a la observación de una corriente quiral macroscópica sobre la superficie expuesta a la radiación, abriendo la puerta a un nuevo mecanismo para la transferencia de energía de la radiación a través de la rotación de los estados cuánticos del sistema electrónico.

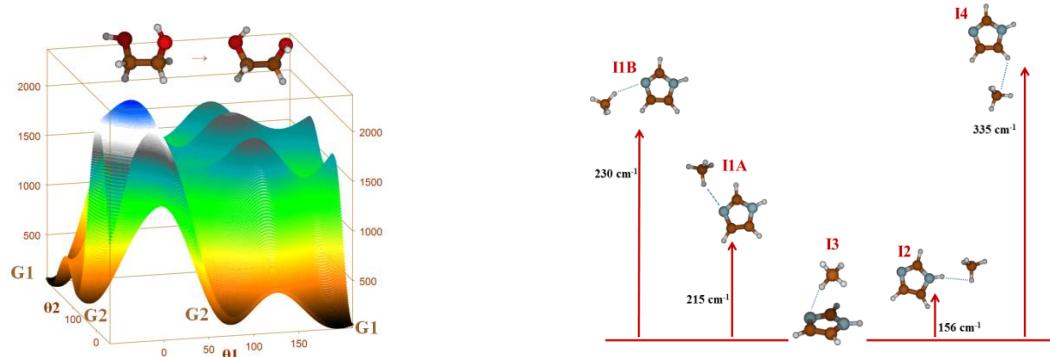
QUÍMICO-FÍSICA TEÓRICA APLICADA A LA ASTROFÍSICA Y AL ESTUDIOS DE NUEVOS MATERIALES

El grupo emplea métodos ab initio altamente correlacionados para caracterizar especies moleculares y procesos químicos de interés astrofísico, así como para describir nuevos materiales con aplicación a la captación y almacenamiento de CO₂.

Durante el año 2015, hemos realizado estudios moleculares de sistemas de interés astrofísico clasificables en dos sub-líneas de investigación: espectroscopía molecular de moléculas prebióticas no-rígidas, caracterización estructural y espectroscópica de especies semi-rígidas. Empleamos siempre, como herramienta básica, métodos ab initio de alto nivel para determinar estructuras moleculares y superficies de energía potencial. A partir de estas y de nuestros códigos

rovibracionales ENEDIM y FIT-ESPEC predecimos propiedades espectroscópicas. Todos los sistemas son de interés para el estudio de la físico-química en fase gas de los medios interestelar y circunestelar y de las atmósferas planetarias. Desde 2004, hemos realizado estudios muy detallados y completos dirigidos a la caracterización de cadenas carbonadas de importancia astrofísica aumentando progresivamente la complejidad de los sistemas estudiados. Estas cadenas se consideran relevantes tanto como especies aisladas como intermediarios de reacciones de formación de grandes moléculas como son los PAHs o los fulerenos. Para caracterizar cadenas de pequeño tamaño, se han empleado métodos muy precisos. Inicialmente estudiamos cadenas puras tipo C_n con un número de átomos n reducido ($n=4,5$). Estas especies que no tienen momento dipolar permanente son susceptibles de ser detectadas con técnicas de infrarrojo. En el infrarrojo lejano se pueden observar a través de sus movimientos de flexión. Durante 2013, hemos llevado a cabo un estudio exhaustivo de las formas neutras, aniónicas y catiónicas del C_6N en colaboración con investigadores de la Universidad King Saud de Ryad. En colaboración con el laboratorio de Astrofísica del Instituto de Física de Rennes y dentro del proyecto AnionCos estamos estudiando aniones de pequeñas cadenas carbonadas. Estas especies, difícilmente tratables a nivel laboratorio por su baja estabilidad, presentan momento dipolar permanente y por lo tanto son observables mediante radioastronomía. Teniendo en cuenta la evolución de los estados electrónicos de baja energía a lo largo de los procesos de formación y destrucción de dichos aniones, hemos propuesto una regla general que permite predecir la detectabilidad de los aniones en fuentes astrofísicas. Para todas las cadenas carbonadas estudiadas, se han caracterizado estructuras isoméricas; se han calculado superficies de potencial para los primeros electrónicos estados electrónicos, así como propiedades rovibracionales incluyendo efectos de anarmonicidad. Se prevén posibles canales de isomerización así como intersecciones cónicas y efectos rovibrónicos.

Los nuevos observatorios radioastronómicos van a permitir detectar nuevas moléculas y nuevas variedades isotópicas siempre y cuando se conozcan sus espectros en las regiones milimétricas y submilimétricas. Los cálculos ab initio altamente correlacionados permiten determinar las estructuras de mínimo de dichas moléculas así como obtener conjuntos iniciales de parámetros espectroscópicos que pueden facilitar la asignación de dichos espectros. Especial interés tiene el cálculo para caracterizar espectroscópicamente especies prebióticas no-rígidas que presentan niveles vibracionales susceptibles de estar poblados a muy bajas temperaturas y que se pueden detectar en estados vibracionales excitados en zonas de formación estelar. Este año 2015, se ha prestado atención especial a las moléculas orgánicas de gran complejidad que presentan enlaces de hidrógeno intramoleculares, como el etilen-glicol. En colaboración con la Universidad de Lille, estamos realizando estudios que contienen hidrógeno, así como grupos carbonilo (carbonato de dimetilo y acetona).



Por último y dentro del entorno de la Acción Marie Curie FP7-CAPZEO, estamos realizando estudios de la interacción del CO_2 y de contaminantes con imidazoles. Se trata de predecir la capacidad de materiales tipo ZIF (Zeolitic Imidazolate Frameworks) para la captación de residuos atmosféricos. Los cálculos moleculares (potenciales de interacción y estructuras) se aprovecharán en estudios posteriores de simulación de sólidos. Durante 2015, hemos enfatizado en el estudio de la competencia entre el CO_2 y otros gases de efecto invernadero (SF_6 , CH_4) al ser captados por la ZIF's.

2A.2 DPTO. DE ESPECTROSCOPIA NUCLEAR, VIBRACIONAL Y DE MEDIOS DESORDENADOS

LÍNEAS DE INVESTIGACIÓN:

- Física Nuclear Experimental
- Estudio de estados nucleares excitados y resonantes.
- Estudio de la estructura nuclear en reacciones con núcleos exóticos y estables a energías bajas, medias y relativistas.
- Simulaciones por computación usando la herramienta FairRoot para experimentos de Física Nuclear.
- Sistemas carentes de orden de largo alcance.
- Instrumentación avanzada.
- Espectroscopía sobre superficies.
- Bioespectroscopía.
- Nano-Fotónica
- Plasmónica y Metamateriales
- Físico-Química de los procesos de Deposición y ablación.
- Aplicaciones Biológicas de la Espectroscopía Vibracional.

SUBLÍNEAS DE INVESTIGACIÓN:

- Caracterización de la estructura nuclear mediante reacciones elásticas y de ruptura así como a través de la desintegración beta.
- Estudio del mecanismo de ruptura de estados excitados en múltiples partículas.
- Estudio de las propiedades estructurales de núcleos en reacciones a energías relativísticas.
- I+D de centelladores para el calorímetro CALIFA para el experimento R3B@FAIR.
- Medida de momentos magnéticos en núcleos exóticos mediante haces de iones radiactivos.
- Instrumentación nuclear.
- Métodos computacionales en Física Nuclear experimental (R3BRoot).
- Herramientas de análisis de datos (Root).
- Experimentación en Física Nuclear Experimental para FAIR.
- Comportamiento físico a nano-escalas.
- Estructura y dinámica microscópica de materia condensada desordenada.
- Desarrollo de instrumentación avanzada para Fuentes de neutrones.
- Espectroscopía vibracional intensificada por superficies (SERS, SEF y SEIRA) sobre nanoestructuras metálicas.
- Espectroscopía vibracional aplicada al estudio del Patrimonio Histórico-Artístico.
- Espectrocopías SERS, SEF y SEIRA aplicadas a la detección de contaminantes y sustancias empleadas en dopaje deportivo.
- Aplicaciones biológicas del SERS: estudio de la interacción fármaco/biomolécula.
- Resonancias plasmónicas en nanoestructuras metálicas (nanoantenas).
- Metamateriales con materiales dieléctricos de alto-índice.
- Nanofotónica de nanohilos semiconductores.
- Espectroscopía de Plasmas de Ablación inducidos por Radiación Láser Infrarroja.
- Espectroscopía de Ruptura Dieléctrica en plasmas inducidos por Láser.
- Identificación de marcadores espectroscópicos infrarrojos y Raman para el diagnóstico de enfermedades neurodegenerativas y neoplásicas.
- Estructura molecular de proteínas y lípidos en alimentos funcionales.
- Aplicación al Estudio de la Nanoestructura de los Conglomerantes Artificiales

TÉCNICAS UTILIZADAS:

- Desintegración beta de núcleos exóticos producidos por el método ISOL, en la instalación ISOLDE y REXISOLDE@CERN.
- Reacciones a baja energía en el acelerador de 5MV CMAM@UAM.
- Reacciones a energías relativísticas en el experimento R3B@GSI.

- Simulaciones de Montecarlo utilizando el código GEANT4.
- Métodos computacionales y Matemáticas.
- Análisis de experimentos en Física Nuclear Experimental.
- Simulación Numérica.
- Dispersión de neutrones.
- Técnicas calorimétricas.
- Medidas de Adsorción de gases.
- Espectroscopía Infrarroja y Raman de correlación bidimensional mediante intercambio isotópico H/D.
- Espectroscopía Visible-UV.
- Espectroscopía de Fluorescencia.
- Microscopía Electrónica de Transmisión (TEM) y de Barrido (SEM).
- Física Teórica y Matemática.
- Espectroscopía Infrarroja (FTIR).
- Espectroscopía Infrarroja
- Espectroscopía de Ruptura Dieléctrica (LIBS).
- Espectroscopía Raman (FTRaman, Macro y micro-Raman, Raman mapping, Raman imaging y SERS).
- Espectroscopía Óptica de Emisión (OES).
- Fluorescencia inducida por Láser (LIF).
- Deposición Asistida por Láser.
- Análisis Estadístico Multivariante.
- Espectroscopía Raman.
- Técnicas de Imaging resueltas espacial y temporalmente.

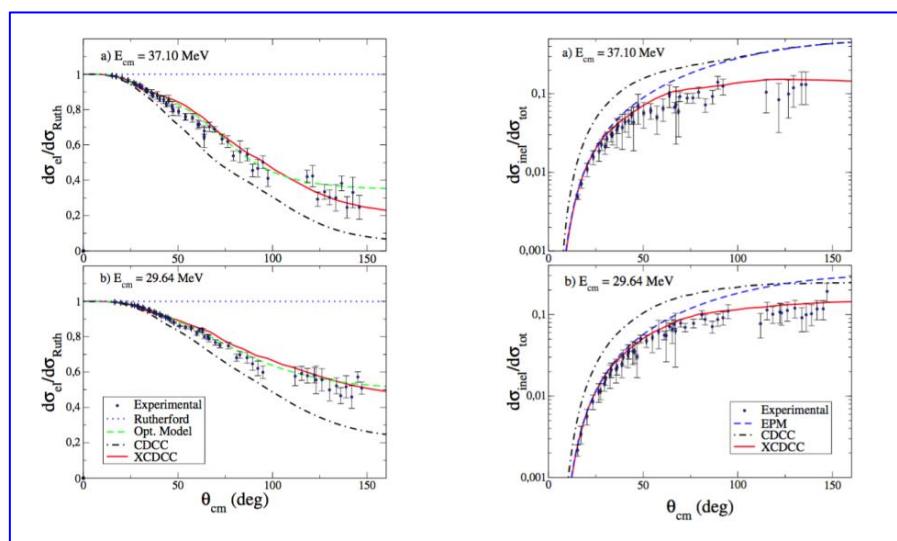
LABOR INVESTIGADORA:

CARACTERIZACIÓN DE ESTADOS NUCLEARES Y REACCIONES RELEVANTES EN PROCESOS DE NÚCLEO-SÍNTESIS ESTELAR

EXPERIMENTO S1202: ESTUDIOS DEL EFECTO HALO EN LA DISPERSIÓN DE ^{11}Be CON UN BLANCO PESADO (Proyecto FPA2012-32443 (Contratado doctorando Vicente Pesudo, Ángel Perea, Olof Tengblad)

La configuración de halo es una distribución exótica de la materia nuclear observable en algunos núcleos con la energía de separación del núcleo es baja (es decir, núcleos próximos o en las líneas de goteo). La estructura se forma cuando uno o dos núcleos débilmente enlazados son dominanteamente en una onda (u onda p en algunos casos raros). Debido a la débil atracción y la baja barrera centrifuglar, las funciones de ondas de estos nucleones tienen una cola que se extiende a grandes radios. Reacciones de núcleos de halo en energías alrededor de la barrera del culombiana nos da información sobre la dinámica del proceso de reacción y el uso de blancos pesados en este régimen, el papel de la interacción coulombiana se muestra fuertemente en comparación con la interacción nuclear.

Dichos estudios constituyen la tesis doctoral titulado “**Análisis de la reacción de un núcleo halo de un neutrón contra un blanco pesado a energías alrededor de la barrera coulombiana: el caso de ^{11}Be contra ^{197}Au** ” de Vicente Pesudo que fue defendida el 19 de Junio del 2015 en Universidad Complutense de Madrid.

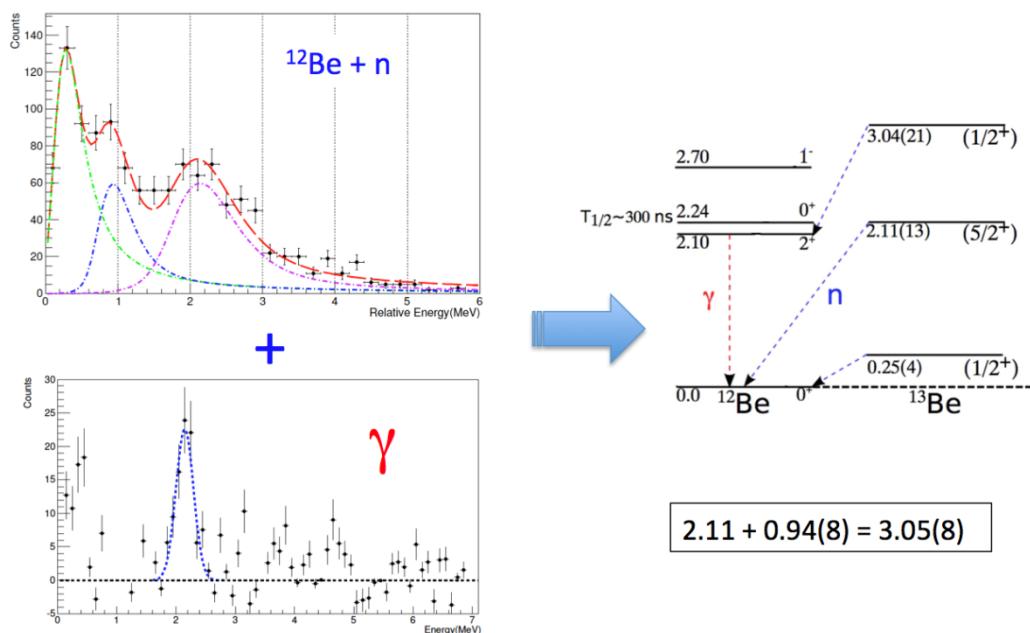


La figura muestra la sección eficaz de ^{11}Be en ^{197}Au a $E_{\text{cm}} = 37,10 \text{ MeV}$ (a) y $29,64 \text{ MeV}$ (b) en comparación con diferentes cálculos teóricos. A la izquierda se muestra la dispersión elástico y a la derecha la probabilidad de dispersión inelástica. Hay una desviación importante de Rutherford en todo el rango angular mostrando la importancia de la transición de E1 en el proceso de colisión. En ambos casos los cálculos de XCDCC explican bien los datos.

EXPERIMENTO S393 R3B@GSI: NÚCLEOS RICOS EN NEUTRONES MÁS ALLÁ DE LA LÍNEA DE GOTEÓ (Proyecto FPA2012-32443, doctorando FPI2010 G. Ribeiro, Enrique Nácher y Olof Tengblad)

El objetivo de este trabajo ha sido el estudio de la estructura de capas del ^{13}Be , un núcleo no-ligado rico en neutrones, utilizando una reacción ($p,2p$) de *knockout*. Este isótopo de Berilio ha sido controvertido a lo largo de los últimos años, lo que le ha convertido en el objetivo de varios estudios, debido a su interés como paso intermedio entre el núcleo Borromeo ^{14}Be y el ^{12}Be . Estudiar este núcleo se ha complicado debido a la dificultad de determinar inequívocamente algunas de las posiciones de sus resonancias, por la incapacidad del método de análisis (masa invariante) de diferenciar entre decaimientos del ^{13}Be a estados excitados o al estado fundamental del ^{12}Be . Para evitar estas ambigüedades es necesario medir en coincidencia los rayos gamma de los estados excitados del ^{12}Be .

El estudio de este tipo de resonancias aporta información sobre fenómenos exóticos que aparecen en los límites de la carta de núcleos como los estados no-ligados, los halos o en algunos casos nuevos números mágicos. Dichos estudios constituyen la tesis doctoral titulada “**Estudios más allá de la línea de goteo de neutrones usando reacciones ($p,2p$) cuasi-libres: El caso del ^{13}Be** ” de Guillermo Ribeiro, que fue defendida el 3 de Julio del 2015 en la Universidad Complutense de Madrid.



La presencia de la coincidencia entre un rayo gamma de 2.1 MeV y un pico en la energía relativa a 0.9 MeV, hace evidente la existencia de una resonancia del ^{13}Be que decae al estado de 2.1 MeV del ^{12}Be . Por lo tanto, consideramos que el pico del espectro de energía relativa localizado a ~ 0.95 MeV proviene de un estado resonante a $2.1 \text{ MeV} + 0.95 \text{ MeV} \simeq 3.05 \text{ MeV}$.

IS577 EXPERIMENT: Nuclear structure study of ^{31}Ar at ISOLDE

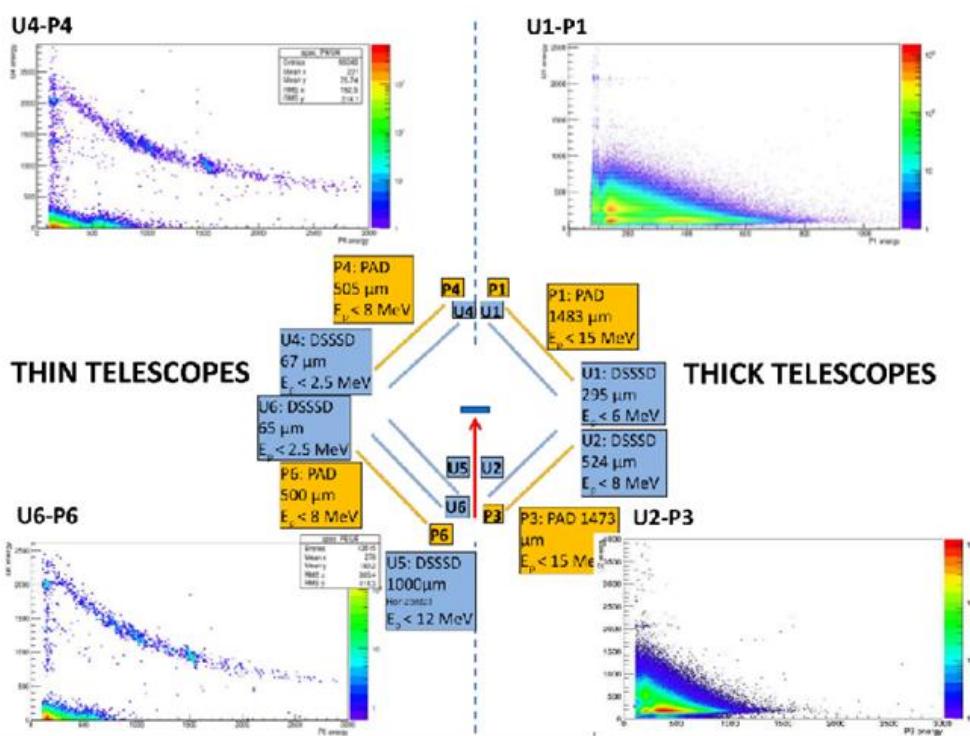
(FPA2012-32443 Project, PhD student FPI2013 Irene Marroquín, Olof Tengblad, Enrique Nácher, Ángel Perea)

La emisión β -retardada de protones consiste en la emisión de protones tras la desexcitación de estados resonantes poblados en el decaimiento β de los núcleos exóticos, cerca de la línea de goteo de protones. Los núcleos de la línea de

goteo de protones tienen grandes valores de Q_β y por tanto, estados no ligados de alta energía son accesibles. En el caso de ^{31}Ar muchos canales de desintegración se abren: $\beta\gamma$, βp , $\beta\bar{p}$, $\beta 2p$, $\beta 2\bar{p}$, $\beta 3p$ y quizás también $\beta 3\bar{p}$. El nucleo ^{31}Ar ha sido estudiado en anteriores experimentos en GANIL e ISOLDE, sin embargo, el canal $\beta 3p$ ha sido observado solo con limitada estadística y $\beta 3\bar{p}$ todavía no ha sido identificado. Con el fin de medir estos canales de decaimiento, la colaboración internacional MAGISOL (Madrid-Aarhus-Goteborg) realizó un nuevo experimento usando un set-up compacto optimizado para la emisión de partículas en la ISOLDE Decay Station (IDS), CERN, Ginebra, Suiza.

La IDS es una nueva iniciativa para tener una estación permanente dedicada a estudios de decaimiento β , permitiendo medir con gran eficiencia rayos gamma y partículas cargadas. Nuestra colaboración instaló una nueva cámara de detección, la MAGISOL Si-Plugin Chamber, que se compone de un conjunto de 5 detectores de silicio multi-segmentados (Double Sided Si Strip Detectors, DSSD) detrás de los cuales hay detectores de silicio no segmentados (PAD) en configuración ΔE -E para la detección de partículas β y partículas cargadas. Este conjunto de detectores de silicio detectan la emisión de protones sobre un amplio rango de energía con una buena resolución energética (25 keV) y consta de 1280 pixeles (5x5 cm, 16x16 strips) resultando en una resolución angular de 3°, ambas cosas necesarias para caracterizar los diferentes canales de emisión protónica del ^{31}Ar . Para completar el set-up, 4 detectores de germanio (HPGe) segmentados rodean la cámara para dar una gran eficiencia de detección de rayos gamma.

La tesis de la estudiante de doctorado Irene Marroquín, está centrada en la preparación, participación y análisis de este experimento.



Detectores DSSD (U1-U6) y PAD (P1-P6) usados en el experimento con indicaciones de espesor y energía requerida para los protones. En el lado de cada telescopio, el correspondiente espectro bidimensional ΔE -E es mostrado.

GANAS - GAMMA&PROTON DETECTION WITH NEW ADVANCED SCINTILLATORS

(<http://www.iem.cfmac.csic.es/departamentos/nuclear/GANASwebpage/html/>)

(Proyecto GANAS: ERANET NupNET PRI-PIMNUP-2011-1333, E. Nácher, O. Tengblad, A. Perea, A. Garzón)

Se ha construido un detector de alta resolución para la detección y la espectroscopia de rayos gamma y protones de alta energía: CEPA4. El detector está formado por cuatro módulos phoswich individual basados en el acoplamiento óptico de 4 cm de $\text{LaBr}_3(\text{Ce})$ a 6 cm de $\text{LaCl}_3(\text{Ce})$. La respuesta del detector de protones de energía media y alta se ha medido en las instalaciones del ciclotrón CCB en Cracovia Polonia. Por primera vez hemos demostrado que podemos reconstruir la energía incidente de los protones, incluso cuando tienen suficiente energía para travesar toda la longitud del cristal. En este contexto hemos medido una resolución de energía del 7% para los protones de 220MeV. Este detector, aunque concebido y construido como prototipo para el diseño final de CEPA para CALIFA R3B, puede encontrar sus propias aplicaciones en experimentos investigando núcleos en desintegración β , así como las reacciones de poca energía con haces radiactivos debido a su alto rendimiento en espectroscopia de rayos gamma y protones.

Además, los autores están explorando sus aplicaciones a la física médica, en particular para realizar la dosimetría de alta precisión en la terapia de hadrones con hasas de ^{12}C , así como tomografía de protones. El trabajo fue publicado como; “Proton response of CEPA4: A novel $\text{LaBr}_3(\text{Ce})$ – $\text{LaCl}_3(\text{Ce})$ phoswich array for high-energy gamma and proton spectroscopy” Nuclear Instruments & Methods A769,105-111,(2015).

Sistema de diagnóstico on-line de haces radioactivos

(*Alejandro Garzón Camacho*)

Desarrollo de un sistema de diagnóstico on-line de isótopos contaminantes en haces radioactivos como los generados en HIE-ISOLDE (CERN). Se trata de un sistema basado en un telescopio de detectores de silicio trabajando en la línea del haz (estructura para medir la energía diferencial (dE) y total (E) que dejan las partículas en estos dos detectores), dos preamplificadores de carga de un canal (Mesytec MPR-1) y un digitizer (Caen DT5780) con firmware DPP-PHA (pulse high analysis). Así, este último conforma la señales que vienen de los dos preamplificadores (uno para cada detector) y guarda los valores de energía asociados a ambos detectores para cada partícula. Tras esto, un programa de desarrollo dedicado en lenguaje Python, se encarga de dibujar on-line un histograma en dos dimensiones (E/dE) de las partículas del haz que se van detectando, que permitirá diferenciar entre los distintos isótopos que hay en el haz.

ESPECTROSCOPIA DE DESINTEGRACIÓN DENTRO DEL PROYECTO EURICA EN RIKEN (JAPÓN)

(*Proyecto FPA2011-29854-C04-01 Andrea Jungclaus, Jan Taprogge*)

MEDIDA DE MOMENTOS MAGNÉTICOS CON HACES EXÓTICOS, RICOS EN NEUTRONES EN REX-ISOLDE

(*FPA2009-13377-C02-02 y FPA2011-29854-C04-01 Andrea Jungclaus, Andrés Illana, Ángel Perea*)

ESPECTROSCOPIA GAMMA EN-HAZ CON EL ESPECTRÓMETRO DALI2 EN RIKEN (JAPÓN)

(*Project FPA2011-29854-C04-01 Andrea Jungclaus, Enrique Nácher*)

COMPORTAMIENTO FÍSICO A NANO-ESCALAS

Probablemente el hidrógeno molecular (H_2) es el candidato actual más claro para sustituir a los combustibles fósiles como vector energético medioambientalmente neutro. El almacenamiento seguro y eficiente de H_2 presenta, sin embargo, una serie de desafíos tecnológicos aún no resueltos. Una de las posibles soluciones es la adsorción del H_2 a bajas temperaturas en materiales nano-estructurados suficientemente ligeros. Sin embargo, las limitaciones prácticas imponen una temperatura mínima de 77 K (la del aire líquido) y unas 50 atmósferas de presión máxima. Esto impone unas condiciones termodinámicas particularmente problemáticas. Por encima de los 33 K el hidrógeno molecular se encuentra en un estado supercrítico lo que implica un fluido que no puede ser condensado. Es decir, mediante interacciones débiles (dispersivas) comparables a las que se dan entre las propias moléculas de tal forma que no se produzca la ruptura de enlace químico de la molécula (fisisorción), el estado termodinámico es tal que no se puede conseguir una retención substancial de las moléculas sobre el substrato adsorbente.

Mediante el uso concurrente de técnicas de dispersión de neutrones y medidas de adsorción en los últimos años hemos podido identificar algunos mecanismos que contribuyen a aumentar sustancialmente la capacidad de almacenamiento de los correspondientes adsorbatos, en particular en nanoestructuras carbonosas.

DESARROLLO DE INSTRUMENTACIÓN AVANZADA PARA FUENTES DE NEUTRONES

En los últimos años gran parte de la labor en este aspecto desarrollada por el grupo ha estado centrada en la candidatura española a la fuente de espalación de neutrones europea (ESS-Bilbao). En mayo del 2009 se produjo un punto de inflexión en este sentido tras alcanzarse un acuerdo informal en Bruselas a favor de la candidatura sueca (Lund) y el siguiente acuerdo suscrito entre el MICINN y el correspondiente ministerio sueco. Como consecuencia el consorcio ESS-Bilbao (Administración Central/Gobierno Vasco) ha reorientado sus actividades. Más concretamente, las actividades en curso están encaminadas a la construcción de una infraestructura local basada en un acelerador de iones ligeros de potencia con objeto de dar servicio a programas de experimentación avanzada no sólo en la producción de haces de neutrones por procesos de fragmentación nuclear (espalación) si no en áreas tan diversas como la Física de Partículas, el estudio de materiales para Fusión Nuclear, la producción de isótopos inestables para estudios en Física Nuclear o las posibles aplicaciones de aceleradores de este tipo en radioterapia oncológica. Tres serían los objetivos principales del centro de aceleradores:

- Servir como un centro de diseño, desarrollo y prototipación de algunas estructuras de aceleración responsables de la ganancia en energía del haz hasta unos 2.5 GeV.
- Nuclear dentro de nuestro sistema de Ciencia-Tecnología-Innovación, un laboratorio especializado en Ciencia y Tecnología de Aceleradores de Potencia, commensurable con los existentes en los países de nuestro entorno que asumen labores de desarrollo y coordinación de los esfuerzos que estos realizan en Grandes Instalaciones Internacionales.

- Dotar a nuestro entramado industrial de herramientas que le permitan posicionarse con ventaja en áreas que requieren el uso de haces de iones ligeros (semiconductores de potencia, industrial aeroespacial, litografía, materiales ultra-duros).

NANOFABRICACION DE PARTÍCULAS PLASMÓNICAS

Se ha continuado con el desarrollo la línea de trabajo consistente en la fabricación de nanopartículas (NPs) metálicas con propiedades plasmónicas interesantes para aplicaciones espectroscópicas y catalíticas. El principal objetivo de esta nanofabricación ha sido la obtención de sistemas nanoscópicos dotados de una morfología tal que permiten una alta intensificación del campo electromagnético. La estrategia seguida para la obtención de estos sistemas ha sido: a) La preparación de NPs anisotrópicas con morfologías especiales que den lugar a de gran intensificación de campo, como nanoestrellas; y b) la asociación de nanopartículas esféricas mediante el uso de moléculas bifuncionales, dando lugar a la formación de cavidades interpartícula o *nanogaps* altamente eficaces en la intensificación de la dispersión Raman (hot spots). Durante el año 2015, se han desarrollado diferentes protocolos para la obtención de nanoestrellas de plata, nanopartículas éstas que no habían sido preparadas hasta la fecha, mediante el estudio experimental de la modificación de las características morfológicas en función de las condiciones experimentales aplicadas. El interés de las nanoestrellas de plata se debe a que estas nanopartículas presentan un mayor número de ventajas respecto a las de oro, como la mayor eficacia SERS (mayores factores de intensificación) y el mayor intervalo de actividad, ya que las NPs de Ag presentan resonancias de plasmón en todo el espectro visible y en la zona del infrarrojo cercano. Los protocolos de nanofabricación empleados por nosotros evitan el empleo de sustancias surfactantes, como las normalmente usadas en la preparación de nanoestrellas de Au, ya que estas sustancias evitan el acercamiento del analito a estudiar a la superficie disminuyendo así la eficacia de estos sistemas en espectroscopía. Se han establecido mecanismos de fabricación de nanopartículas huecas de oro y plata con forma de nanoestrella. Estas nuevas nanopartículas han demostrado interesantes propiedades en la modulación de la resonancia de plasmón, permitiendo encontrar nanopartículas con resonancias situadas en la región del infrarrojo cercano del espectro. Estas propiedades permitirán interesantes aplicaciones de estas nanopartículas en termoterapia y en *drug delivery*. Estas nanopartículas se han caracterizado mediante microscopía TEM y SEM, y microscopía de campo oscuro, espectroscopía SERS y SEF. Finalmente se han publicado estos resultados en la revista *Nanoscale*.

Por otra parte, se ha comenzado a usar superficies nanoestructuradas de plata preparadas mediante la técnica PLD (Pulsed laser deposition) con el fin de emplear sustratos con una estructura nanoscópica más estable y reproducible.

FUNCIONALIZACIÓN DE SUPERFICIES: FABRICACIÓN DE NANOSENSORES

La funcionalización de las superficies metálicas obtenidas mediante autoensamblaje de moléculas orgánicas ha continuado siendo una línea importante en nuestro grupo durante 2015. La funcionalización permite aumentar de manera considerable la sensibilidad y la selectividad de las nanoestructuras fabricadas, dando lugar a superficies de altas prestaciones, al combinar las propiedades físicas de los sistemas metálicos obtenidos e inmovilizados, con las propiedades químicas de las moléculas orgánicas autoensambladas sobre ellos. Además, estas moléculas pueden permitir que las NPs sean biocompatibles, lo que presenta gran interés en aplicaciones médicas, y permiten controlar el acoplamiento de estos sistemas.

Se ha progresado en la realización de experimentos de funcionalización empleando ciclodextrinas y ditioles bifuncionales en un intento de mejorar las prestaciones de estos sistemas orientados hacia la detección de pesticidas altamente insolubles en agua. Estos sistemas presentan una cavidad hidrofóbica interna o intermolecular dentro de la cual pueden alojarse moléculas difíciles de detectar por SERS.

Asimismo, se ha continuado con la investigación consistente en la funcionalización de NPs mediante el ensamblaje de NPs inducido por ditioles alifáticos y aromáticos. Estas moléculas bifuncionales desempeñan una doble función: a) el acoplamiento de nanopartículas con la formación de espacios interpartícula de gran intensificación de campo, y b) la creación de cavidades intermoleculares que permiten el ensamblaje de analitos. La detección de analitos es entonces posible pues éstos se concentran en las cavidades interpartícula donde la intensificación del campo es máxima. En este sentido, se ha completado la caracterización de sustratos empleado ditioles alifáticos con diferente longitud de cadena para ensamblaje de nanopartículas de plata y de oro aplicados en la detección de los pesticidas organoclorados endosulfán, aldrina, dieldrina y lindano. Para ello se ha llevado a cabo una optimización de los sistemas para las diferentes condiciones experimentales (recubrimiento de la superficie por el ensamblador, longitud de onda de excitación, sustrato metálico), determinándose la sensibilidad y especificidad de estas detecciones tras análisis de las isotermas de adsorción. Posteriormente, se ha realizado un estudio similar con ditioles aromáticos empleando ditioles con diferente longitud (uno y dos grupos bencénicos entre los grupos tiol). Los resultados preliminares obtenidos con este tipo de compuestos demuestran que existe una polimerización de estas moléculas mediante la formación de puentes disulfuro, la cual puede estar favorecida por la presencia de los anillos bencénicos. Estos trabajos se han realizado en el marco de la colaboración que nuestro grupo mantiene con investigadores de la Universidad P.J. Safarik de Kosice (Eslovaquia).

DETECCIÓN DE CONTAMINANTES

Durante el año 2015 se ha continuado con la aplicación de la técnica SERS para el análisis directo de sustancias contaminantes que no necesitan funcionalización debido a la adsorción directa con la superficie metálica. En colaboración con investigadores de la Universidad Estadual Paulista de Presidente Prudente en Brasil y la Universidad de Málaga (con los que se mantiene una colaboración como Unidad Asociada del CSIC), se ha realizado un estudio de la detección del pesticida canbendazim. Esta sustancia se emplea de manera usual en prácticas agrícolas en muchas partes del mundo, sobre todo en el tercer mundo o en países emergentes, por lo que la detección precoz de la misma es de mucho interés para poder prevenir los efectos nocivos contra la salud. Este estudio ha consistido en una investigación de la adsorción sobre superficies metálicas, mediante espectroscopía Raman, IR y resonancia de plasmón, asistida por un análisis de modos vibracionales normales por DFT de los complejos metálicos.

En relación con esta línea de trabajo, se ha explorado la detección de pesticidas con estructura triazina, los cuales son de los más usados en agricultura, sobre todo en países emergentes como el Brasil, por ello este trabajo se ha desarrollado en colaboración también con investigadores de la Universidad Estadual Paulista de Presidente Prudente en Brasil. Entre estos pesticidas se encuentran la atrazina y la prometrina, de uso generalizado también en todo el mundo. Los primeros experimentos realizados en nuestro laboratorio demuestran claramente que estos pesticidas sufren modificaciones estructurales evidentes consistentes en la pérdida de los grupos alifáticos externos, lo que incrementa fuertemente su solubilidad en agua. Estas conclusiones permiten predecir cambios evidentes en las posibles consecuencias en la salud que tienen estas sustancias una vez liberadas en el medio ambiente.

INTERACCIÓN BIOMOLÉCULA/NANOPARTÍCULA PLASMÓNICA

Durante el año 2015 se ha progresado enormemente en la investigación de la interacción de moléculas biológicas con nanopartículas metálicas de Ag y Au. Esta línea de trabajo proyecta la funcionalización de NPs con biomoléculas con el fin de aumentar su biocompatibilidad y su especificidad biomolecular. Para ello se ha analizado la adsorción de los péptidos terapéuticos somatostatina, octreotido, lanreotido y pasireotido sobre superficies de plata y de oro. En este sentido se ha investigado en profundidad el efecto de la adsorción en metales sobre el enlace disulfuro existente en estos péptidos. También se han controlado las modificaciones estructurales inducidas por el metal.

Durante el año 2015, se ha completado el análisis estructural de materiales biológicos altamente luminiscentes de origen natural. En este terreno se ha realizado un estudio estructural y dinámico de sustancias polifenólicas procedentes de las sustancias húmicas y melaninas resultantes de procesos de digestión inducidos por hongos. En particular, se ha avanzado en la caracterización SERS/SEF de sustancias húmicas de distinto origen (suelo, leonardita, lignito) sobre NPs de diferente morfología y preparadas mediante diferentes protocolos. Para ello se han empleado muestras llamadas "standard", por ser las que son accesibles comercialmente y se usan en muchos laboratorios. La funcionalización de las superficies con diaminas alifáticas se ha empleado con el fin de aumentar la señal procedente de estos sistemas moleculares de alta complejidad, lo que ha permitido aumentar el rendimiento de los sistemas plasmónicos en la detección de sustancias de alta complejidad estructural, debido a la carga negativa existente en estos compuestos naturales. Estos trabajos se han realizado en colaboración con investigadores de la Universidad de Bolonia (Italia).

FLUORESCENCIA INTENSIFICADA POR SUPERFICIES METÁLICAS

Durante el año 2015 se ha continuado con el estudio de la formación de complejos de diferentes fármacos con supramoléculas transportadoras, los cucurbituriles. Por otro lado, también se ha progresado en el estudio de nuevos sistemas transportadores de fármacos complejos, de tamaño micrométrico, basados en la inclusión de nanopartículas de plata con el medicamento en los nanoporos de un polímero sintético biodegradable y biocompatible, el PBS. El estudio se ha llevado a cabo en estructuras porosas de diferente tamaño. Las técnicas usadas para la caracterización en ambos casos han sido espectroscopías de fluorescencia y Raman y amplificadas, SEF y SERS.

Los fármacos utilizados en el estudio han sido los anti-inflamatorios no esteroideos ketorolaco, indometacina y piroxicam y el antitumoral emodina, con los que ya se tiene experiencia en el laboratorio.

En el caso de los cucurbituriles se han obtenido, cuando ha sido posible, la estequiometría del complejo, el pH de formación, las constantes de unión y la especie molecular de fármaco incluido. Para los sistemas de inclusión del medicamento en polímero nanoporoso se han establecido las condiciones de fabricación de los nanoporos que dan una óptima infiltración e inmovilización del fármaco.

TÉCNICAS ESPECTROSCÓPICAS APLICADAS AL ESTUDIO, CONSERVACIÓN Y RESTAURACIÓN DE OBRAS DE ARTE Y MONUMENTOS

En el año 2015 se ha llevado a cabo el análisis vibracional de varios alcaloides (harmalol, harmalina, harmina y harmania) que forman parte de la Ruda Siria. Se ha realizado la asignación de los modos normales de vibración de los espectros Raman calculados con el programa Gaussian a las bandas de los espectros SERS de dichos alcaloides. Este

trabajo se ha llevado a cabo en colaboración por el Prof. Lombardi, del City College of New York, con el objeto de ayudar en el estudio de la adsorción de las moléculas de alcaloides sobre coloides de Ag.

Se ha continuado con la fabricación de nanopartículas de plata por irradiación láser a 442 nm sobre fibras de lana, en colaboración con Universidad de Bolonia, durante las estancias en nuestro departamento de una estudiante de máster. El empleo de este tipo de substratos metálicos es muy interesante para el análisis de pigmentos y tintes de interés artístico, puesto que se pueden preparar directamente en un punto específico del material (fibras, en este caso), además de no dejar ninguna marca en el mismo. La irradiación a 442 nm da lugar a nanopartículas más versátiles que irradiando a 532 nm. En el primer caso se pueden obtener espectros SERS a varias longitudes de onda (442, 532 y 785 nm), mientras que en el segundo, solo se pueden llevar a cabo análisis SERS a 532 nm. Las nanopartículas preparadas se han empleado para analizar colorantes sintéticos sobre fibras patrón de lana teñidas y sobre muestras reales. Se han estudiado tintes de diferentes grupos, tales como triarilmelanos, xantenos y monoazo.

Por otra parte, durante la estancia de otra estudiante de Máster de la misma Universidad, se ha llevado a cabo la identificación de colorantes antraquinónicos tales como alizarina, purpurina y ácido carmínico en muestras patrón de preparaciones de pinturas al temple y muestras reales. Para este trabajo, se emplearon distintas estrategias, tales como el empleo de coloides concentrados, sin concentrar y nanopartículas fabricadas por irradiación láser. En estas muestras, a diferencia del estudio de colorantes en fibras, el empleo de pequeños volúmenes de coloides ligeramente concentrados ha resultado más eficaz.

En colaboración con el grupo de Láseres, Nanoestructuras y Procesado de Materiales del Instituto de Química-Física Rocasolano se ha estudiado la limpieza con láser de ultravioleta de muestras de plata sulfurada, tanto pura como esterlina. En particular, se emplearon las técnicas de microscopía óptica y Raman para estudiar las modificaciones físicas y químicas de las muestras tras la irradiación a diversas longitudes de onda (213 y 266 nm).

Se ha continuado con la aplicación de la espectroscopía Raman y la técnica SERS en el estudio de pigmentos contenidos en manuscritos islámicos antiguos procedentes de Marruecos. El empleo de nanopartículas de Ag aplicadas sobre determinadas zonas coloreadas de los manuscritos estudiados y el uso del Raman confocal, que permite un aumento de la resolución espacial de las medidas, ha puesto de manifiesto la presencia de pigmentos de naturaleza antraquinónica en dichos manuscritos, incluso en tintas de color negro. Se está aplicando la técnica SERS en la detección de posibles pigmentos de naturaleza orgánica en tintas de coloración amarilla, negra y verde. Este trabajo se ha realizado gracias a la colaboración con investigadores de la Universidad Moulay Ismail de Meknes en Marruecos.

En colaboración con el Instituto de Ciencia y Tecnología de Alimentos y Nutrición (ICTAN, CSIC) se ha realizado un estudio sobre aplicaciones de la espectroscopía FTIR para determinar las estructuras de lípidos y proteínas y sus posibles interacciones en la formación de diversas emulsiones de aceite de oliva en agua. En particular se han estudiado emulsiones estabilizadas con proteína de soja y otras emulsiones estabilizadas con esta proteína, caseinato sódico y transglutaminasa. Una relación entre las propiedades texturales y estructurales proteolípicas resultó ser dependiente del sistema proteico estabilizador usado en estas emulsiones.

Se está desarrollando un trabajo de síntesis de geles C-S-H, principal componente de los materiales artificiales de construcción, con el fin de evaluar las modificaciones estructurales del mismo por el cambio de la relación Ca/Si inicial. Debido a la naturaleza amorfa del compuesto, las evoluciones estructurales se estudian a través de técnicas espectroscópicas (Raman y ²⁹Si RMN). La microestructura de los geles se estudia por TEM.

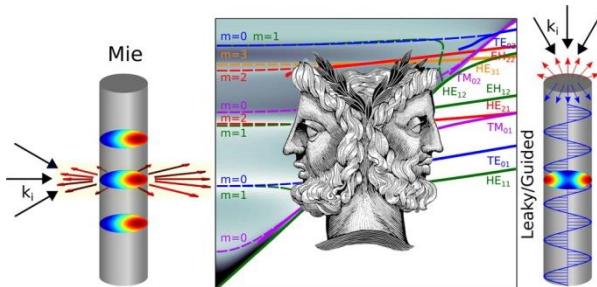
En colaboración con el IETCC se trabaja en el desarrollo de tratamientos consolidantes, en el que se utilizan emulsiones alcohólicas de nanopartículas de Ca(OH)₂ como principio activo. El objetivo es incrementar la solubilidad del calcio para disminuir la concentración de producto que hay que aplicar.

En colaboración con Servicio de Criminalística del Instituto Nacional de Toxicología y Ciencias Forenses de Madrid, se está desarrollando una metodología de análisis de huesos basado en el estudio de los espectros Raman.

FOTOLUMINISCENCIA Y FOTODETECCIÓN CON NANOHILONES SEMICONDUCTORES

El control de la emisión de luz es esencial para desarrollar fuentes de luz nanométricas más eficientes. Hasta ahora, dicho control se realiza con elementos ópticos externos que generan numerosas pérdidas y disminuyen sensiblemente la eficiencia del emisor. El uso de fuentes de luz intrínsecamente direccional y polarizadas elimina la presencia de estos elementos externos, lo que supone un paso importante para el diseño de nanodispositivos altamente eficientes como potenciales fuentes luminosas. En nuestro trabajo se muestra que se pueden emplear antenas semiconductoras para controlar las características de la emisión de luz. Las medidas experimentales de fotoluminiscencia de nanohilos semiconductores, obtenidas mediante microscopía de Fourier (ver figura), determinan las características de la emisión y permiten controlar su direcciónalidad y polarización, en función del diámetro del nanohilo.

Esto se ha realizado en colaboración con el grupo del Prof. Jaime Gómez Rivas FOM-Institute AMOLF (Amsterdam) y Philips Research Labs (Eindhoven).



Por otra parte, se ha investigado la absorción de luz en nanohilos semiconductores a través de un modelo teórico unificado y simulaciones numéricas. Primero demostramos teóricamente a partir de la relación de dispersión de modos electromagnéticos y las secciones eficaces de extinción de Mie para nanohilos infinitos que ambos se reescriben como ecuaciones formalmente equivalentes que dan lugar (a modo de Jano bífrente) tanto a modos *leaky/guiados* como a resonancias de Mie. Para nanohilos semiconductores finitos, el ángulo de incidencia es crítico (ver figura): la absorción está dominada por las resonancias de Mie en ángulos de incidencia perpendicular (y oblicua); por el contrario, la excitación de un modo guiado puede mejorar la absorción en incidencia rasante. Tal predicción teórica puede ser explotada para optimizar los diseños de nanohilos en aplicaciones de fotodetección y absorción (células solares) en dominios espectrales y angulares amplios.

METAMATERIALES BASADOS EN ESTRUCTURAS DIELÉCTRICAS DE ALTO ÍNDICE DE REFRACCIÓN

Hemos llevado a cabo una descripción completa de la estructura de bandas fotónicas de redes de nanohilos metalo-dieléctricos (núcleo-coraza) doblemente resonantes, con el fin de demostrar su comportamiento como metamateriales con índice de refracción negativo (NIM, del inglés) en el óptico y con buenas propiedades: bajas pérdidas e isótropos. Hemos demostrado que tales redes de nanohilos, organizadas como películas plano-paralelas, se comportan como lentes NIM planas robustas, esto es, con la resolución menor que la longitud de onda e independencia de la posición del dipolo fuente. Nuestros resultados y procedimientos sirven para evaluar plenamente las fascinantes propiedades como NIM ópticos de redes de nanohilos híbridos, allanando el camino hacia su posible fabricación gracias a la tolerancia a imperfecciones geométricas y a inhomogeneidades. Además, hemos propuesto teóricamente la existencia de resonancias magnéticas de plasmones localizados en medios eficaces (metamateriales) con permeabilidad magnética negativa ($\mu < 0$) basados en meta-átomos dieléctricos de alto índice (HRI, del inglés). Se ha desarrollado a su vez una condición universal para la ocurrencia de tales fenómenos plasmónico-magnéticos, revelando a partir de materiales disponibles y parámetros de tamaño razonables que se pueden observar en casi todo el espectro electromagnético, desde las microondas, THz, hasta regímenes de infrarrojo lejano e incluso cercano al visible. Nuestro trabajo teórico allana el camino hacia una plasmónica de $\mu < 0$, de forma que la riqueza de las aplicaciones de la plasmónica "eléctrica" se podrían obtener recíprocamente en su contraparte "magnética".

MÉTODOS TEÓRICOS Y NUMÉRICOS EN ESPECSTROSCOPIA PLASMÓNICA

Hemos presentado una revisión general de los avances recientes en Plasmónica, en materia de herramientas teóricas y numéricas requeridas para la determinación de las propiedades espectrales de las nanopartículas con forma compleja que exhiben fuertes resonancias de plasmones de superficie localizados (LSPR, del inglés). Se han descrito enfoques cuasi-estáticos así como métodos electrodinámicos completos, proporcionando una comparación exhaustiva de sus implementaciones numéricas. Además, se han documentado los medios para abordar el diseño de geometrías complejas para obtener espectros LSPR "ad-hoc", con especial interés en los algoritmos bio-inspirados. Se han discutido en detalle varios ejemplos muy relevantes: espectroscopía Raman intensificada por superficies metálicas (SERS, del inglés) y calentamiento óptico, ambos para el caso de nanopartículas aisladas; y nanoantenas multifrecuencia para intensificación de la fluorescencia y óptica no lineal.

ESPECTROSCOPIA EN PLASMAS DE ABLACIÓN INDUCIDOS POR RADIACIÓN LÁSER INFRARROJA

Hemos aplicado nuestras técnicas de análisis y excitación a muestras biológicas. El plasma generado mediante LIBS en tejido muscular de cerdo se ha investigado utilizando un láser de CO₂ de alta potencia. El plasma muestra emisiones debidas a especies atómicas neutras Na, K, C, Mg, H, N y O, especies ionizadas C⁺, C²⁺, Mg⁺, N⁺ y O⁺ y bandas moleculares de CN(B²S⁺ - X²S⁺), C₂(d³P_g - a³P_u), CH(B²S⁺ - X²Π ; A²Δ - X²Π), NH(A³Π - X³Σ⁻), OH(A²Σ⁺ - X²Σ⁺), y CaOH(B²S⁺ - X²Σ⁺; A²Π - X²Σ⁺). Hemos focalizado nuestro trabajo en el estudio de la dinámica del plasma expandiéndose en el aire a presión atmosférica y en vacíos de 0.8 y 0.01 Pa. Con técnicas de imagen 2D resueltas espacial y temporalmente se han podido estudiar las dinámicas de diferentes especies atómicas e ionizadas. Igualmente se han medido y resuelto espacial y temporalmente las densidad electrónica y la temperatura del plasma. Para ciertas especies del silicio y magnesio se han estimado sus velocidades promedio en el plasma.

Hemos estudiado la evolución espacio-temporal del plasma producido por la ablación de monóxido de silicio (SiO) inducida por un láser de CO₂ de alta energía. Las técnicas utilizadas para ellas han sido Espectroscopía de Emisión Óptica (OES), OES resuelta en el tiempo, técnicas de imagen 2D resueltas espacial y temporalmente. El plasma resultante resultó fuertemente ionizado produciendo especies iónicas como Si⁺, O⁺, Si²⁺, O²⁺ and Si³⁺, siendo rico en átomos de silicio y oxígeno neutros y débiles bandas moleculares de SiO. Se registraron las imágenes del plasma

resueltas espectralmente y espacialmente (distancia del blanco) mediante 2D OES resuelta en el tiempo. Se caracterizó el comportamiento temporal de líneas de emisión específicas de las especies Si, Si⁺, O⁺, Si²⁺ y O²⁺ resultando en un decaimiento más rápido de las especies O²⁺ y Si²⁺ que las de O⁺, Si⁺ y Si atómico. Se calculó la densidad electrónica del plasma a diferentes tiempos de su expansión mediante el ensanchamiento Stark de algunas líneas aisladas de silicio monoionizado. La temperatura de excitación del plasma se estimó mediante las intensidades relativas de dos líneas del Si²⁺ y la ecuación de Boltzman, variando a diferentes tiempo entre 1 y 3 eV.

BIOESPECTROSCOPIA INFRARROJA Y RAMAN

Dentro del proyecto Innepacto IPT-2012-0769-010000 se ha aplicado la espectroscopía infrarroja y Raman para analizar la composición del plasma sanguíneo y su estructura proteica, correspondiente a 23 sujetos sanos, 39 pacientes con la enfermedad de Alzheimer (EA) y 42 con demencia frontotemporal en su desarrollo inicial, siendo estos tres grupos de edad similar. El análisis multivariante aplicado a la totalidad de muestras estudiadas hasta ahora conduce a una clasificación correcta en torno al 90% para la distinción entre sujetos sanos y pacientes con la EA, y a una clasificación correcta de muestras de aproximadamente el 85% en el diagnóstico diferencial entre pacientes con la EA y pacientes con demencia frontotemporal.

Dentro del proyecto Retos-Colaboración (RTC-2014-1842-1), se ha realizado análisis infrarrojo y Raman de diversas muestras (10) de líquidos pleurales y ascíticos correspondientes a sujetos sanos y pacientes de enfermedades neoplásicas, considerando los espectros medidos de componentes en estado sólido y en disolución de proteínas (VEGF, MCP-1) y ácidos nucleicos cuyos contenidos se pueden alterar en líquidos ascíticos y pleurales de pacientes neoplásicos. Se ha realizado una selección previa de regiones espectrales para iniciar el análisis discriminante dirigido a identificar marcadores espectrales.

2A.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR

LÍNEAS DE INVESTIGACIÓN:

- Física molecular de atmósferas, sistemas astrofísicos y plasmas.
- Fluidodinámica Molecular.
- Espectroscopía Láser.
- Física Molecular Teórica.

SUBLÍNEAS DE INVESTIGACIÓN:

- Física Molecular de sistemas atmosféricos y astrofísicos.
- Cinética de plasmas fríos y estudios de interacciones plasma-superficie.
- Dinámica y cinética de reacciones químicas.
- Espectroscopía Raman en chorros supersónicos de gases.
- Transferencia de energía por colisiones moleculares inelásticas.
- Cristalización en microchorros criogénicos de líquidos moleculares.
- Espectroscopía infrarroja de iones moleculares de interés astrofísico.
- Parámetros espectroscópicos de moléculas relevantes en procesos atmosféricos o de combustión.
- Espectroscopía de alta resolución de iones moleculares de interés astrofísico.
- Control cuántico molecular.
- Alineamiento y orientación molecular.
- Gases cuánticos ultrafríos.
- Estudio y caracterización espectroscópica de filosilicatos.

TÉCNICAS UTILIZADAS:

- Espectroscopía de infrarrojo y spectrometría de masas aplicadas a sistemas de baja temperatura y presión.
- Métodos Computacionales: Gaussian, SIESTA, CASTEP, CRYSTAL.
- Generación de plasmas fríos en descargas de gases a baja presión.
- Espectrometría de masas de iones y neutros con resolución de energía.
- Espectroscopía visible de emisión de plasmas.

- Sondas de Langmuir para medidas de energía electrónica y de densidad de carga.
- Espectroscopía Raman lineal y estimulada
- Chorros supersónicos de gases.
- Microchorros de líquidos subenfriados.
- Criogenia.
- Espectroscopía de Doble resonancia Raman-Raman.
- Espectroscopía Infrarroja por Diferencia de Frecuencias.

LABOR INVESTIGADORA:

FÍSICA MOLECULAR DE ATMÓSFERAS, SISTEMAS ASTROFÍSICOS Y PLASMAS

Esta línea de investigación se subdivide en los cinco apartados detallados a continuación.

Física molecular de sistemas atmosféricos y astrofísicos

Alrededor de 2006 empezamos una nueva línea dedicada al estudio de sistemas sólidos que pudieran servir de modelo de objetos astrofísicos. Desde esa fecha hemos trabajado sobre mezclas de hielos de agua, dióxido de carbono, metano y metanol, que son algunos de los más abundantes constituyentes de los núcleos de los cometas y de otros sistemas astronómicos. Hemos estudiado estos sistemas por medio de espectroscopía de infrarrojo y espectrometría de masas. Mediante una cámara de alto vacío y un criostato refrigerado por He en circuito cerrado podemos alcanzar hasta unos 6 K, lo que nos permite acceder a un rango de temperaturas muy interesantes en el ámbito astrofísico. En los párrafos siguientes describimos en mayor detalle las contribuciones más relevantes obtenidas durante el año 2015.

La posible presencia de moléculas relacionadas con procesos biológicos en muestras astrofísicas es la base para el estudio en el laboratorio de especies y sistemas afines. El auge de la ciencia o especialidad conocida como astrobiología en los últimos años nos ha motivado para enfocar parte de nuestras investigaciones a este campo. En concreto, en el 2015, hemos estudiado la estabilidad del aminoácido glicina en condiciones que simulan las encontradas en el interior de nubes densas del medio interestelar, en particular, el bombardeo con electrones de alta energía que simulan el procesado por rayos cósmicos. Este aminoácido se ha encontrado en cometas y condritas carbonáceas, y se ha tomado como paradigma para el estudio en el laboratorio de este tipo de moléculas. Dependiendo de la temperatura y condiciones de los experimentos, la radiólisis de la glicina ha dado lugar a la formación de compuestos como CO₂, OCN- y posiblemente amidas. Una de las conclusiones del estudio es que la pervivencia de glicina, posiblemente formada en un primigenio sistema solar, en el sistema solar actual, es poco probable.

Dentro de este campo se enmarca también un estudio teórico de la interacción de glicina sobre un soporte formado por carbón amorfó hidrogenado (HAC en sus siglas en inglés). Este material se ha modelado de acuerdo con estimaciones previas de partículas “blandas” o “duras”, con mayor o menor contenido de hidrógeno atómico en la muestra. Hemos comprobado que la glicina se une a estas superficies por medio de su grupo acídico COO-, y que cuando existen varias moléculas de glicina, tienden a formar enlaces de hidrógeno entre ellas. Los resultados teóricos se han comparado con determinaciones experimentales a través de sus espectros de infrarrojo.

Hemos iniciado una colaboración con el grupo de los profesores N. Watanabe y A. Kouchi del Institute of Low Temperature Science de la Universidad de Hokkaido en Sapporo (Japón), para el estudio de hielos formados por mezclas de CO y H₂O. Nuestra aportación inicial consiste en modelos teóricos para simular las muestras experimentales generadas en los laboratorios de Japón, y tratar de reproducir los espectros de IR que allí han registrado. Este trabajo está todavía en marcha, y se esperan resultados publicables a lo largo del 2016.

Mantenemos la colaboración con el grupo del Dr. Guillermo Muñoz Caro del Centro de Astrobiología CSIC-INTA, en diversos campos. Hemos calculado espectros de IR lejano de hielos de mezclas de H₂O y CH₃OH, y de H₂O y NH₃, siguiendo una pauta empezada el año anterior. También hemos colaborado en medidas cuantitativas de fotoprocesado de hielo de CO₂.

Así mismo, continuamos desarrollando una nueva línea que nos abre un amplio campo de posibilidades. En ella combinamos varias de nuestras técnicas experimentales. Mediante la técnica llamada “plasma enhanced chemical vapor deposition” (PECVD) generamos, en descargas de hidrocarburos, depósitos que sirven como modelos para las partículas carbonáceas presentes en entornos astrofísicos. Estos depósitos se analizan con espectroscopía infrarroja, y pueden ser irradiados por fuentes externas como radiación UV o de rayos X, electrones, protones, etc. Se espera utilizarlos también como sustratos de adsorción para todo tipo de moléculas.

A nivel experimental hemos diseñado y encargado fabricar una nueva cámara, que nos permita alcanzar el rango de vacío de 10^{-11} mbar, lo que se conoce como ultra alto vacío. Este sistema nos abrirá un gran abanico de posibilidades, como la simulación de procesos astrofísicos que requieran una gran pureza, o involucren escalas de tiempo muy largas. En la parte atmosférica, se continúa con la colaboración con la Dra. María Teresa Baeza Romero, de la Universidad de Castilla La Mancha, con la que se obtuvo financiación del Ministerio de Economía y Competitividad, para el estudio de la formación y reactividad de aerosoles de yodo, desde un punto de vista teórico y experimental. En este 2015, hemos realizado ya los primeros estudios experimentales y teóricos. Así mismo, y en colaboración con el Dr. Alfonso Sáiz López, del IQFR, CSIC, hemos realizado un estudio de la fotolización del yodato en hielo de agua. El interés radica en que este mecanismo de fotolización, y la posible liberación de una especie de yodo “reactiva” en fase gas, podía explicar las altas concentraciones de IO medidas en la Antártida. Por medio de este estudio se determinó por primera vez la sección eficaz del yodato a baja temperatura (en hielo de agua). Este resultado fue incorporado a un modelo químico de la atmósfera Polar, y teniendo en cuenta este proceso, el modelo sugiere que la concentración de IO en la Antártida sería aumentada entre 1-1.5 pptV. Estos niveles son menores que los valores más altos medidos, pero podían concordar con valores típicos en el interior del continente Antártico, y de alguna manera contribuir a los altos valores registrados en zonas costeras. Este trabajo ha sido publicado en el ACPD y está pendiente de evaluación para su publicación definitiva en el ACP. Además ha sido presentado en el congreso “8th INTERNATIONAL Conference on Advanced Vibrational Spectroscopy” en Viena como charla invitada.

Por otro lado durante este año se ha llevado a cabo una colaboración con el Dr. Hinrich Grothe de la U. Tecnológica de Viena. Esta colaboración ha tenido como objetivo el analizar la interacción de la fase alpha del trihidrato de ácido nítrico (α -NAT) con el hielo de agua. En este trabajo han intervenido grupos de diferentes países (Austria, Alemania, Inglaterra y Suiza). Por primera vez se desveló la estructura de esta fase y en este trabajo se ha puesto de manifiesto que tiene una especial afinidad por el agua, mayor que la más estable fase beta. Los resultados de este trabajo han sido mandados para publicación a la prestigiosa revista Angewandte Chemie International Edition.

Además se ha comenzado a estudiar en las zonas del infrarrojo medio y lejano e igualmente se han medido los espectros ultravioleta y visibles del aerosol atmosférico descrito como polvo mineral, el cual está compuesto básicamente por filosilicatos tales como esmectitas y montmorillonitas, junto a partículas que varían desde 2 hasta 50 μm de cuarzo, feldespato, calcita, óxidos de hierro y aluminio, silicio, yeso y aragonito. Así mismo en colaboración con la Dra. Ana María Fernández del CIEMAT se ha finalizado la caracterización experimental y teórica de Palygorskita de Serradilla (Cáceres).

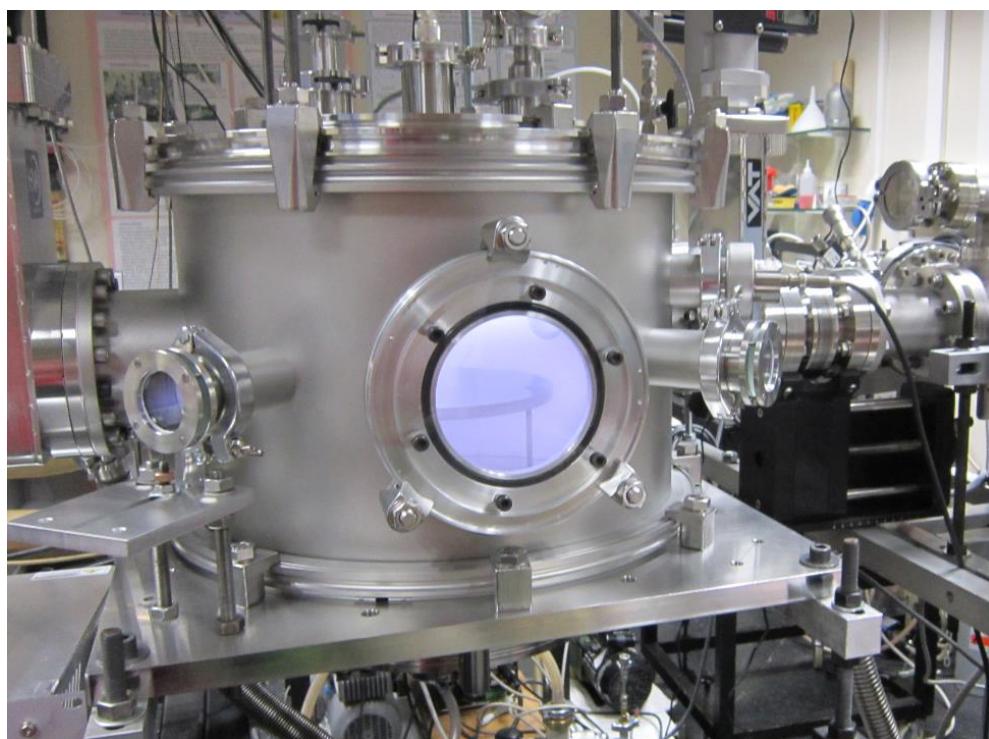
Dentro de la colaboración habitual con el Dr. Pedro Gómez de la U. Complutense a través de la vigente Unidad Asociada en la que estamos incluidos, en este último año hemos iniciado una nueva línea encaminada a predecir espectros en la zona de IR próximo de sólidos amorfos, como los hielos de mezclas de hidrocarburos con agua. El objetivo es comparar esos espectros con los que se obtienen en misiones astronómicas principalmente en el sistema solar. Estos cálculos son prolíficos, pero los resultados previsibles serían de gran interés.

Los principales resultados de estas líneas están reflejados en las publicaciones correspondientes, reseñadas más adelante en esta Memoria.

Cinética de plasmas fríos y estudios de interacciones plasmas-superficies

Continuando los estudios sobre cinética de plasmas fríos, hemos completado un estudio de plasmas de $\text{H}_2 + \text{O}_2$ en distintas proporciones de mezcla a nivel experimental y hemos elaborado un modelo cinético que permite investigar los procesos responsables de la generación en superficie de H_2O como producto estable, así como las reacciones en fase gas y la aparición de iones protonados mayoritarios como H_3^+ y H_3O^+ y O_2^+ , según la proporción de mezcla del gas precursor. Como novedad a resaltar en este modelo frente a otros desarrollados anteriormente por nosotros para simular descargas de otros gases precursores, cabe destacar la incorporación de iones negativos, que contribuyen al descenso de electrones libres en el plasma.

Hemos realizado estudios dedicados a la formación de películas carbonadas de interés astrofísico mediante plasmas generados en descargas de radiofrecuencia inductivas con mezclas de He y CH_4 , y a su caracterización y posterior procesado. En colaboración con el Laboratorio de Hielos de nuestro departamento, se ha analizado la naturaleza de las películas depositadas sobre muestras de silicio mediante espectroscopía IR por Transformada de Fourier (FTIR), y posteriormente las muestras se han irradiado con haces de electrones de 5 keV a fin de investigar posibles cambios estructurales.



Laboratorio de Plasmas Fríos. Plasma a baja presión en una descarga de radiofrecuencia capacitiva para formar análogos de polvo interestelar.

Contando con financiación del proyecto Synergy de la UE “Nanocosmos”, hemos diseñado y montado un equipo experimental completo con el fin de generar análogos de polvo carbonáceo interestelar en una descarga capacitiva de radiofrecuencia y simular los procesos más importantes. Este equipo se encuentra actualmente en fase de caracterización y puesta a punto (ver figura anterior).

Los principales resultados quedan reflejados en las publicaciones y contribuciones a congresos de esta Memoria.

Dinámica y cinética de reacciones químicas

Hemos continuado nuestros estudios, en colaboración con el grupo del Prof. F. J. Aoiz de la Universidad Complutense, sobre reacciones del sistema MuHH y variantes deuteradas. En concreto hemos abordado el estudio químico cuántico de la reacción D+MuH ($v=1$) y hemos observado la aparición de un profundo pozo atractivo en el potencial adiabático correspondiente al canal de salida DMu+H que sugiere la formación de un “enlace vibracional”, de origen dinámico y no asociado con un mínimo del potencial electrónico. En el momento actual estamos analizando las características de este pozo atractivo y sus implicaciones en la reactividad.

También hemos estudiado la influencia de la excitación rotacional de los reactivos en el sistema H+D₂ ($v=0, j$) mediante cálculos clásicos y mecanocuánticos. Los resultados de ambos tratamientos son esencialmente coincidentes y muestran que la excitación rotacional es más eficaz que la translacional para promover la reactividad cuando la energía total es alta. Por el contrario, a valores bajos de la energía, el efecto de la rotación se ve inhibido por las restricciones estéricas del potencial y su eficacia relativa es menor que la de la translación. Los resultados también muestran que la excitación rotacional de la molécula reactiva aparece como energía translacional en los productos.

Control Cuántico Molecular. Alineamiento y Orientación Molecular.

Se ha continuado el estudio del control del alineamiento y la orientación de una molécula aislada mediante combinación de pulsos láser y campos estáticos. Se ha extendido la técnica de evolución adiabática del Hamiltoniano de Floquet al desarrollo de un método muy general para controlar la excitación o desexcitación rotacional y simultáneamente alinear coherenteamente moléculas en estados iniciales excitados en J con M arbitrario.

Gases Cuánticos Ultrafríos

Hemos continuado el estudio del control del alineamiento y orientación de moléculas dipolares en interacción en una red óptica en régimen de tight binding. Hemos optimizado el control preciso del entrelazamiento entre las moléculas mediante la combinación de tres técnicas: control de orientación en cada nodo mediante la intensidad del campo laser local, ruptura controlada la simetría espacial de la red aplicando patrones de intensidad diferente en nodos contiguos y,

por último, variación adiabática del eje de polarización del campo láser respecto al eje de la red óptica para inducir cruces controlados en las cuasienergías.

Control Cuántico Molecular. Alineamiento y Orientación Molecular. Gases Cuánticos Ultrafríos

Se ha completado la extensión de la técnica de evolución adiabática del Hamiltoniano de Floquet al desarrollo de un método muy general para controlar la excitación rotacional y simultáneamente alinear coherentemente moléculas en estados iniciales excitados en J con M arbitrario.

Se ha continuado el estudio del control del alineamiento y orientación de moléculas dipolares en interacción en una red óptica. Se ha demostrado la posibilidad de control preciso del entrelazamiento entre las moléculas, mediante la combinación del control de la orientación en cada nodo, el control de la simetría espacial de la red y la variación adiabática del eje de polarización del campo láser respecto al eje de la red óptica con el fin de inducir cruces controlados en las cuasienergías.

Se ha desarrollado un modelo simplificado para optimizar el transporte cuántico de átomos o moléculas en presencia de interacción. El control del parámetro de interacción permite iniciar o bloquear el proceso de transporte en un gas ultrafrío de un modo muy preciso.

FLUIDODINÁMICA MOLECULAR

El grupo de Fluidodinámica Molecular está especializado en el estudio cuantitativo de los flujos de fluidos fuera del equilibrio. Durante 2015 se ha continuado con el estudio de estos flujos en la interfase entre la descripción microscópica, esencialmente molecular y cuántica, y la macroscópica, regida por la mecánica de fluidos en el régimen del continuo. Si bien ambas vertientes están bien desarrolladas como campos independientes, su conexión es una especie de tierra de nadie donde escasean los datos experimentales, los modelos teóricos suficientemente rigurosos, y los métodos de cálculo eficientes. Los chorros supersónicos de gases son un medio extraordinariamente fértil, en el que es viable el estudio de las colisiones moleculares inelásticas, el mecanismo fundamental de transferencia de energía en gases. Los chorros de líquidos subenfriados son un medio ideal para estudiar experimentalmente la solidificación homogénea, libre de los efectos de las paredes de recipientes y de impurezas.

Se ha concluido el estudio de las colisiones inelásticas $\text{H}_2\text{O}(\text{gas}): \text{He}$, en colaboración con el grupo de Teoría y Simulación de Interacciones Moleculares, del Instituto de Física Fundamental del CSIC. Partiendo de nuestras medidas y de los cálculos del grupo teórico se han obtenido unos coeficientes de transferencia nivel-a-nivel $\text{H}_2\text{O}: \text{He}$, que reproducen los experimentos dentro del 15% entre 20 y 120 K. Como continuación de este trabajo, se ha realizado un estudio de los coeficientes de ensanchamiento de 21 líneas del espectro rotacional del H_2O por colisiones con He. Al ensanchamiento contribuyen tanto las colisiones elásticas como las inelásticas. Partiendo de nuestros coeficientes de transferencia inelásticos del trabajo anterior, se demuestra que la contribución elástica aumenta mucho a baja temperatura, pero difiere mucho de una línea a otra, lo que impide en la práctica su modelización mediante leyes empíricas sencillas.

Se han realizado nuevas medidas de mezclas de *para*- H_2 y *normal*- H_2 con $\text{H}_2\text{O}(\text{g})$ para estudiar las colisiones $\text{H}_2\text{O}:\text{H}_2$, de gran interés astrofísico. La principal dificultad aquí es determinar con precisión las temperaturas traslacionales, debido a las propiedades fluidodinámicas anómalas (viscosidad volumétrica) del H_2 . Las medidas del año anterior en chorros con números de Reynolds altos muestran roturas de equilibrio muy pequeñas entre rotación y traslación, lo que introduce errores considerables al invertir la ecuación cinética maestra de las poblaciones rotacionales. Para buscar las condiciones óptimas, se han medido en puntos fijos mezclas *para*- H_2 con H_2O en distintas concentraciones, lo que ha permitido además cuantificar la influencia del H_2O en la relajación del *para*- H_2 .

Tras ello, se han realizado nuevas medidas de *para*- H_2 y *normal*- D_2 a presiones óptimas (~250 mbar), cuyo análisis se utilizará como referencia para las mezclas con H_2O .

Se ha avanzado considerablemente en una formulación molecular de la teoría fluidodinámica de los jets supersónicos que permite una mejor utilización de los datos experimentales de densidades y poblaciones rotacionales. Esta teoría permite una interpretación clara de dos magnitudes fundamentales hasta ahora comprendidas muy deficientemente y que no se pueden determinar experimentalmente de forma directa: la temperatura translacional y la entropía a lo largo del jet. Ambas se pueden expresar ahora macroscópicamente mediante expresiones relativamente asequibles, y microscópicamente en términos de tasas de colisión inelástica. En paralelo con estos progresos se ha mejorado sustancialmente el protocolo de reducción de datos crudos a datos refinados, lo que permite una cuantificación mucho más precisa de las derivadas funcionales asociadas con las descripciones macro- y microscópica del jet. La aplicación de lo anterior a la interpretación de diversos jets de H_2 en un amplio rango de temperaturas (250 a 5 K) muestra progresos sustanciales. La comprensión y cuantificación precisa de estos jets es esencial para la interpretación de las colisiones $\text{H}_2\text{O}:\text{H}_2$, de importancia fundamental en la astrofísica molecular.

En el apartado de desarrollo instrumental, se han fabricado toberas en rendija mediante un método nuevo: pegando dos valvas de cuchilla separadas por un espaciador. De esta forma se ha conseguido una tobera de $30\text{ }\mu\text{m} \times 2\text{ mm}$, que se ha probado satisfactoriamente con N_2 , y se ha caracterizado su campo de flujo. Las toberas en rendija producen expansiones en una dimensión solamente, con una variación más suave de las magnitudes gas-dinámicas, lo que permite medir con precisión la relajación colisional a temperaturas más altas que desde toberas circulares.

Se ha concluido un trabajo sobre los agregados pequeños (“clusters”) de *orto*- D_2 , en la zona de la vibración fundamental ($\sim 2990\text{ cm}^{-1}$). Estos clusters se producen en chorros supersónicos desde toberas criogénicas y se observan en el espectro Raman mediante líneas a menor frecuencia que la de la molécula libre. Los desplazamientos medidos en nuestro laboratorio se han calculado por el grupo de P.N. Roy de la Universidad de Waterloo (Canadá). Por otra parte, hemos observado nuevas transiciones del dímero $(\text{oD}_2)_2$ en la zona de rotación ($\sim 180\text{ cm}^{-1}$). El acoplamiento de la rotación del dímero con la de los monómeros constituyentes da lugar a una estructura muy compleja, en cuya interpretación se está trabajando.

Se han registrado espectros Raman torsionales de dimetil-éter (DME), tanto del isotopómero natural como con ^{13}C , y del DME enfriado en chorros supersónicos. Para ello se ha tenido que emplear una célula especial para expandir gases agresivos (inflamables, disolventes, etc.). La región de los sobretonos torsionales del DME es compleja por el acoplamiento con el modo de flexión C-O-C y la abundancia de bandas calientes, pero es de interés astrofísico para detectar estas moléculas en el medio interestelar. El espectro del DME enfriado ha permitido asignar sin ambigüedad los sobretonos torsionales y sus primeras bandas calientes, rectificando la asignación errónea de la literatura. Este trabajo es una colaboración con el Departamento de Química y Física Teóricas del IEM (M. L. Senent) y con la Universidad de Huelva (M. Carvajal).

Finalmente, se ha continuado la colaboración con la Universidad de Frankfurt (Alemania) sobre la cristalización de microchorros líquidos (filamentos). Se ha completado el estudio de los filamentos de *para*- H_2 y *ortho*- D_2 impurificados con Ne, donde se observa que la presencia de pequeñas cantidades de Ne ralentiza enormemente la cinética de formación del cristal y afecta su estructura. Se han realizado con éxito los primeros experimentos de scattering de rayos X de filamentos de Ar y Kr en el sincrotrón DESY en Hamburgo (Alemania). Se ha conseguido registrar imágenes de difracción del líquido y del cristal con alta resolución temporal ($\sim\text{ns}$), lo que permite seguir la cristalización del filamento como en los experimentos por scattering Raman en nuestro laboratorio.

ESPECTROSCOPÍA LÁSER

Parámetros espectroscópicos de moléculas relevantes en procesos atmosféricos o de combustión

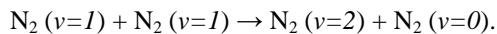
Durante los primeros meses del año 2015 se acometió el estudio, mediante espectroscopía Raman estimulada, del isotopólogo ^{13}C del tetrafluoruro de carbono, CF_4 . A diferencia del isotopólogo principal, $^{12}\text{CF}_4$, el $^{13}\text{CF}_4$ ha sido poco estudiado y la mayor parte de sus bandas vibracionales prohibidas por las reglas de selección infrarrojas pero permitidas por las reglas de selección Raman nunca habían sido observadas mediante espectroscopía de alta resolución. En el transcurso de nuestro estudio se registraron espectros de las ramas Q de la banda fundamental ν_1 , el sobretono $2\nu_2$, la banda caliente $\nu_1 + \nu_4 - \nu_4$ y el sobretono de banda caliente $3\nu_2 - \nu_2$. En el caso de ν_1 y $2\nu_2$ los registros se realizaron a temperatura ambiente y a 140 K, mientras que las dos bandas calientes se registraron únicamente a temperatura ambiente.

El análisis de los espectros, aún en curso, se está llevando a cabo por el Profesor V. Boudon en la Universidad de Borgoña mediante el uso de modelos específicos para moléculas trompoesféricas, y permitirá la obtención de constantes moleculares refinadas para este isotopólogo.

Continuando la colaboración con la Dra. Ha Tran y Tuong Le Cong (Laboratoire Interuniversitaire de Systèmes atmosphériques, Cretéil, Francia) se han llevado a cabo estudios IR de alta resolución del muestras de HCl disuelto en SF_6 con el fin de validar cálculos de dinámica molecular para predecir ensanchamientos colisionales en un intervalo amplio de presiones con gases perturbadores muy pesados. También, en colaboración con el mismo grupo, hemos estudiado los perfiles de líneas aisladas de CH_4 en mezclas con He. En colaboración con el Dr. Daniel Lisak del Institute of Physics de la Nicolaus Copernicus University in Torun y otros laboratorios, hemos caracterizado exhaustivamente el perfil de líneas de absorción de H_2O disuelto en N_2 para validar el perfil propuesto por la IUPAC como nuevo estándar para las líneas de absorción en las bases de datos espectroscópicas (el perfil de Hartman-Tran), en substitución del, ya desaconsejado, perfil de Voigt.

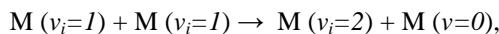
Espectroscopía Raman de estados excitados poblados mediante bombeo óptico y colisiones moleculares.

Durante los estudios de relajación colisional realizados en 2014 sobre la molécula de $^{14}\text{N}_2$, basados en experimentos de bombeo-prueba Raman-Raman, se observó que el estado vibracional excitado $v=2$ resultaba significativamente poblado a pesar de que el bombeo óptico depositaba población únicamente en el estado energéticamente inferior $v=1$. Esta transferencia de población a $v=2$ sólo podía estar ocurriendo a través de colisiones del tipo

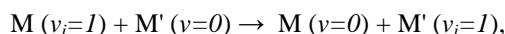


La presencia de una cantidad significativa de población en $v=2$ permitió la observación experimental de la segunda banda caliente ($v=3 \leftarrow v=2$) en la molécula de $^{14}\text{N}_2$. A la vista de los resultados obtenidos, se decidió adoptar este tipo de esquema experimental secuencial (bombeo óptico + transferencia de energía colisional + espectroscopía) para realizar estudios en otras moléculas, ya que el bombeo óptico seguido de la transferencia de energía colisional permite poblar estados a los que resulta difícil acceder de otras maneras. Este tipo de experimento requiere la optimización de las condiciones de presión de la muestra y del retardo entre bombeo y espectroscopía para de este modo maximizar la transferencia de población a los estados excitados que se desea estudiar, pero resulta especialmente destacable el hecho de que en nuestro caso se puede llevar a cabo manteniendo presiones de muestra relativamente bajas, del orden de milibares o decenas de milibares, lo que permite obtener espectros en condiciones de alta resolución y por tanto resolver la estructura de las ramas Q de las bandas vibracionales observadas.

En moléculas con varios modos de vibración existe además la posibilidad de poblar estados pertenecientes a modos vibracionales v_j diferentes del estado poblado inicialmente mediante bombeo óptico v_i , ya que además de encontrar colisiones del tipo



análogas a las ya mencionadas anteriormente para el caso del $^{14}\text{N}_2$, hay que tener en cuenta los tipos genéricos



que también pueden darse en los instantes posteriores al bombeo óptico. Por tanto, los diferentes tipos de colisiones proporcionan acceso a un amplio abanico de estados excitados susceptibles de poblarse y ser estudiados en la etapa de espectroscopía.

Como primera aplicación sistemática de esta técnica, en la segunda parte de 2015 se inició un estudio, que aún se encuentra en curso, de los diferentes isotopólogos ^{13}C del acetileno ($^{12}\text{C}_2\text{H}_2$, $^{13}\text{C}_2\text{H}_2$ y $^{12}\text{C}^{13}\text{CH}_2$) a baja temperatura con objeto de buscar transiciones entre estados anteriormente no observados. Hasta la fecha, la técnica ha permitido registrar espectros Raman de alta resolución correspondientes a cinco bandas calientes vibracionales anteriormente no observadas, lo que representa un logro considerable en moléculas tan bien estudiadas como la familia de los acetilenos.

Espectroscopía infrarroja de iones moleculares de interés astrofísico.

Se ha acometido el registro del espectro de absorción de alta resolución del ión HCl^+ . Este ión molecular tiene un interés fundamental tanto en química como en astronomía, y es una molécula clave en la química del cloro en el espacio. Por otra parte, se trata de una molécula ideal para estudiar separadamente los efectos de acoplamiento spin-órbita y spin-spin en moléculas diatómicas. El HCl^+ ha sido identificado recientemente en el espacio y caracterizado en el laboratorio en la zona de ondas milimétricas (THz). Existe asimismo una cantidad notable de datos procedentes de espectroscopía de emisión visible-ultravioleta. Sin embargo, la carencia de datos en la zona de vibración-rotación es llamativa, limitándose a unas pocas líneas registradas con una precisión moderada (0.001 cm^{-1}). Este hecho, junto con el de que no existen en la actualidad satélites espaciales u observatorios terrestres capaces de realizar nuevas medidas en esa zona del espectro, justifica el interés en obtener datos precisos de las transiciones de vibración rotación, que podrían ser observadas desde tierra con telescopios que operan en la zona del IR-medio. Se han optimizado las condiciones de producción en la cámara de descarga en cátodo hueco y se han registrado un total de 160 nuevas transiciones con una exactitud en torno a 3 MHz de los isotopólogos H^{35}Cl^+ y H^{37}Cl^+ en los estados $^2\Pi_{1/2}$ y $^2\Pi_{3/2}$. En colaboración con el Dr. Brian Drouin del JPL (NASA) estos nuevos datos se han integrado en un ajuste global junto con el resto de datos disponibles en la literatura a un hamiltoniano efectivo, permitiendo la determinación de nuevos parámetros espectroscópicos y la mejora de algunos de los existentes, y se prevé incluir/actualizar los resultados en la base de datos del JPL (Millimiter and sub-millimiter wave spectral line catalog). El estudio ha mostrado asimismo indicios de efectos debidos a la estructura hiperfina del protón que no han sido estudiados hasta la fecha, y que no han podido ser observados en los estudios previos en la zona de THz. El registro de más transiciones y a menor temperatura, permitirá elucidar.

Desde el punto de vista experimental cabe destacar la instalación de un nuevo cristal mezclador PPLN (“Periodically poled Lithium niobate”) que ha permitido aumentar en un factor de más de 10 la potencia IR disponible en el espectrómetro. También se han realizado modificaciones en la célula de descarga en cátodo hueco encaminadas a permitir su refrigeración con fluidos criogénicos.

2A.4 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR

LÍNEAS DE INVESTIGACIÓN:

- Simulación multiescala de materiales poliméricos y macromoléculas biológicas.
- Propiedades físicas y nanoestructura de polímeros.
- Física de polímeros: Movilidad y orden en sistemas macromoleculares.
- Aplicación de la luz sincrotrón al estudio de polímeros y materiales nanoestructurados.
- Biofísica.
- Intercaras.

SUBLÍNEAS DE INVESTIGACIÓN:

- Nanoindentación en materiales poliméricos.
- Nanocomuestos poliméricos: Estructura y propiedades físicas.
- Confinamiento en la estructura y la dinámica de la materia condensada blanda.
- Conformación de materia blanda biológica: Proteínas de membrana en disolución.
- Estudio de los procesos de microdeformación, relación con la nanoestructura y optimización de propiedades mecánicas.
- Primeros estadios de la cristalización de polímeros sometidos a campos de deformación de tipo cizalla.
- Estudio de la nanoestructura de materiales multilaminares mediante dispersión de rayos X a ángulos ultra-pequeños (USAXS).
- Desarrollo de la estructura y propiedades de polímeros naturales y nanocomuestos.
- Procesos de recristalización en sistemas semirrígidos.
- Fenómenos de precrystalización, cristalización y transiciones de fase en polímeros sintéticos y naturales.
- Estudio de las reacciones de polimerización mediante cálculos mecano-cuánticos.
- Simulación jerarquizada de dinámica macromolecular.
- Nuevas poliolefinas con arquitectura controlada: estructura y propiedades.
- Dinámica molecular y propiedades viscoelásticas.
- Procesos de extrusión y elongación en poliolefinas y mezclas.
- Dinámica molecular y propiedades dieléctricas.
- Interrelación estructura-dinámica en materia condensada blanda polimérica.
- Microscopía electrónica de transmisión: estructura y morfología de polímeros sintéticos y biológicos.
- Hidrodinámica de proteínas y complejos macromoleculares biológicos.

TÉCNICAS UTILIZADAS:

- Dispersión y difracción de rayos X a ángulos grandes (WAXS), pequeños (SAXS), ultra-pequeños (USAXS) y con incidencia rasante (GISAXS), incluyendo el uso de micro- y nano-haces de radiación sincrotrón.
- Calorimetría diferencial de barrido (DSC).
- Dispersión cuasielástica de neutrones (IQNS).
- Microscopía óptica y de barrido (SEM).
- Espectroscopía Raman.
- Nanoindentación.
- Dispersión de neutrones.
- Espectroscopía dieléctrica de banda ancha.
- Reometría de cizalla en torsión dinámica y continua, de extrusión capilar y elongacional.
- Análisis dinamo-mecánico en flexión.
- Análisis mecánico en tracción: módulo elástico.

- Análisis mediante fraccionamiento por temperatura de cristalización (CRYSTAF-TREF).
- Microscopía electrónica de barrido y transmisión (STEM) y de fuerzas atómicas (AFM).
- Cromatografía de permeabilidad en gel (GPC) y tetradección y dispersión dinámica de luz láser (DLS).
- Litografía de nanoimpresión (NIL).
- Espectroscopía de correlación de rayos X (XPCS).
- Micro-espectroscopía de rayos X en transmisión con barrido (STXM).
- Simulaciones mediante uso de computación de alto rendimiento.

LABOR INVESTIGADORA:

Grupo de NANOESTRUCTURA Y PROPIEDADES MECÁNICAS DE SISTEMAS POLIMÉRICOS

ESTADO ACTUAL DE LA APLICACIÓN DE LA TÉCNICA DE NANOINDENTACIÓN A NANOCOMPUESTOS DE BASE POLIMÉRICA

Una gran parte de nuestra actividad investigadora durante 2015 ha estado centrada en la recopilación bibliográfica de estudios de nanoindentación en nanocomuestos de base polimérica, con objeto de ofrecer un punto de vista amplio y crítico sobre el estado actual de este tema. El trabajo incluye matrices poliméricas termoestables y termoplásticas, y también una gran variedad de nanorrefuerzos, en especial aquéllos basados en carbono tales como los nanotubos de carbono, el grafeno o el nanodiamante. Una búsqueda bibliográfica sencilla sobre la aplicación de la técnica de nanoindentación a nanocomuestos poliméricos pone de manifiesto las discrepancias aparentes entre los distintos estudios. Nuestro trabajo sugiere que éstas son debidas en gran medida a una selección indebida de las condiciones experimentales y/o a un análisis inadecuado de los datos. Una vez que estos dos factores se han tenido en cuenta apropiadamente, la técnica de nanoindentación demuestra ser una herramienta extremadamente útil para el estudio de las variaciones de módulo elástico, dureza y fluencia con la incorporación del nanorrefuerzo. Se ha podido constatar que las matrices termoestables, vítreas y semicristalinas presentan distintos mecanismos de reforzamiento y que la mejora de sus propiedades depende fundamentalmente de la naturaleza del nanorrefuerzo, de su dispersión y su interacción con la matriz. Además, el trabajo discute la influencia de otros factores como la forma, las dimensiones o la anisotropía de forma del nanorrefuerzo, así como la morfología de la matriz. Por otra parte, nuestro estudio ofrece una comparación entre los resultados obtenidos por nanoindentación y aquéllos derivados del uso de técnicas macroscópicas, y abre una discusión sobre las posibles razones de las discrepancias observadas. Finalmente, el trabajo recopilatorio sugiere los retos y perspectivas de la aplicación de la indentación instrumentada al estudio de las propiedades mecánicas de materiales nanocomuestos poliméricos.

EL MECANISMO DE REFUERZO DEL GRAFENO EN MATRICES POLIMÉRICAS HIDROFÍLICAS

El grafeno ofrece grandes perspectivas como material de refuerzo de matrices poliméricas, no sólo por sus excelentes propiedades mecánicas, sino porque al mismo tiempo puede conferir conductividad eléctrica a la matriz y mejorar las propiedades térmicas y de barrera. Hasta la fecha, la efectividad del grafeno como refuerzo se viene discutiendo en términos de su dispersión adecuada y su interacción con la matriz polimérica. Nuestro trabajo, realizado en colaboración con los doctores H. Salavagione, G. Martínez, G. Ellis and M. A. Gómez-Fatou (ICTP-CSIC), presenta un novedoso punto de vista sobre el mecanismo que controla la mejora de las propiedades mecánicas de matrices hidrofílicas con grafeno. Los polímeros hidrofílicos como el poli (alcohol vinílico) (PVA) absorben agua con el consiguiente deterioro de las propiedades mecánicas. En este trabajo hemos analizado el efecto de la incorporación de una pequeña cantidad de grafeno (1.8 wt%) unido covalentemente a PVA sobre las propiedades mecánicas de superficie, medidas mediante indentación instrumentada. Los experimentos se llevaron a cabo en diversas condiciones de humedad relativa y han puesto de manifiesto que el mecanismo de refuerzo del grafeno no está relacionado con su efectiva dispersión en la matriz sino, fundamentalmente, con un cambio en la afinidad al agua de la matriz hidrofílica. De esta manera, se muestra que el conocido deterioro de las propiedades mecánicas del PVA, debido al efecto plastificante del agua a niveles altos de humedad ambiental, puede quedar totalmente inhibido por la presencia del grafeno.

Grupo de DINÁMICA Y ESTRUCTURA DE LA MATERIA CONDENSADA BLANDA (SOFTMATPOL)

NANOESTRUCTURACION DE MATERIA CONDENSADA BLANDA CON MORFOLOGIAS CONTROLADAS

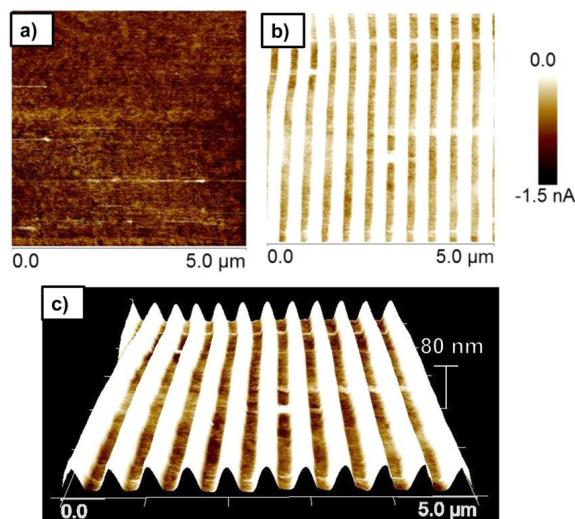
Nanorrejillas poliméricas mediante litografía por nanoimpresión (NIL)

Se han preparado nanorrejillas del polímero semicristalino poly(propylene azelate) (PPAz) mediante litografía por nanoimpresión (NIL) de películas delgadas. La morfología y la estructura de las nanorrejillas se han investigado

combinando Microscopía de Fuerzas Atómicas (AFM) y dispersión de rayos X con incidencia rasante tanto a ángulos pequeños (GISAXS) como grandes (GIWAXS). Los resultados revelan que la nanoestructuración mediante NIL afecta significativamente la orientación de las laminillas cristalinas. En las nanorrejillas de PPAz las laminillas con orientación “edge-on” son más abundantes que en la muestra sin nanoestructurar. Atribuimos este efecto a la preferencia del PPAz de cristalizar con las laminillas con orientación “flat-on” con las superficies de silicio tanto del molde como del sustrato. Estos resultados prueban que la técnica de NIL es apropiada para controlar la orientación cristalina en polímeros.

Estructuras superficiales periódicas inducidas por láser (LIPSS) en polímeros semiconductores

Hemos continuado explotando las posibilidades de utilización de rayos láser con el fin de nanoestructurar la superficie de películas delgadas de polímeros. En cooperación con el grupo de las Dras. M. Castillejo y E. Rebollar (IQFR-CSIC) hemos tenido éxito en la nanofabricación inducida por láser de nanosegundos con diferentes longitudes de onda de estructuras superficiales periódicas (LIPSS) en películas delgadas de polímeros semiconductores con aplicación en celdas solares orgánicas. Hemos investigado la formación de LIPSS en películas delgadas del polímero semiconductor poly(3-hexylthiophene) (P3HT). Hemos utilizado dos longitudes de onda diferentes, 266 and 532 nm, y un amplio rango de fluencias y número de pulsos con el fin de optimizar los LIPSS. El periodo y la profundidad de las estructuras se pueden controlar mediante los parámetros del láser. En particular el alto grado de absorción del P3HT a 532 nm permite la formación de nanoestructuras ordenadas con periodicidad de unos 460 nm. Las técnicas de absorción de rayos X (NEXAFS) y espectroscopía Raman revelan una buena estabilidad química del P3HT durante la formación de LIPSS. Mediante la medida de propiedades eléctricas con el microscopio de fuerzas atómicas (C-AFM) se ha observado que la conducción eléctrica es mayor en las zonas bajas de los LIPSS que en las altas. Las técnicas de espectroscopía Raman resonante y GIWAXS indican una pérdida de cristalinidad de la película de P3HT durante la formación de los LIPSS, sugiriendo la fusión de la superficie. Este efecto produce que las zonas altas tengan un menor orden que la película original y por tanto menor conductividad.



Imágenes de C-AFM de una película delgada de P3HT medida a un voltaje constante de -5 V . (a) Película sin irradiar, (b) película con LIPSS fabricados a 532 nm , 26 mJ/cm^2 , and 4800 pulsos. (c) Superposición de las imágenes de corriente y altura de P3HT con LIPSS.

Fabricación mediante láser de nanoestructuras ferroeléctricas para memorias orgánicas no volátiles

Se han preparado LIPSS en películas delgadas ferroeléctricas del copolímero poly(vinylidene fluoride-trifluoroethylene). Aunque este copolímero no absorbe la luz a la longitud de onda del láser, se han podido obtener LIPSS a partir de una bicapa con otro polímero que si absorbe a esa longitud de onda. La naturaleza ferroeléctrica de la bicapa nanoestructurada se comprobó mediante medidas de piezorrespuesta con el AFM. Se obtuvieron ciclos de histéresis tanto en la bicapa sin estructurar como estructurada, y además esta última presenta un incremento en la densidad de información almacenada de un orden de magnitud en comparación con la bicapa original.

Ferroelectricidad y dinámica molecular de nanopartículas de copolímeros de polivinilideno de fluoruro y tetrafluoroetileno

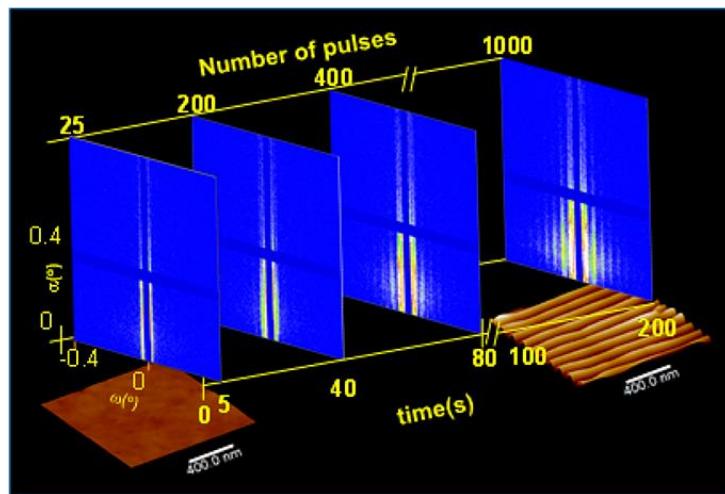
Mediante la técnica de nanoprecipitación por diálisis se prepararon nanopartículas poliméricas ferroeléctricas de copolímeros de polivinilideno de fluoruro y tetrafluoroetileno. Mediante este método se obtuvieron nanopartículas semicristalinas de 280nm de diámetro medio, según la caracterización por microscopía de fuerza atómica. La naturaleza ferroeléctrica de las nanopartículas se demostró mediante microscopía de piezorespuesta, calorimetría diferencial de barrido, difracción de rayos X y espectroscopía de dieléctrica de banda ancha. Las nanopartículas de PVDF-TrFE presentan una transición de ferro-paraeléctrica menor que la que se observa en el material sin estructurar. En la fase

paraeléctrica las nanopartículas muestran una intensa relajación dieléctrica asociada con el movimiento rotacional de los dipolos en la fase cristalina paraeléctrica. La naturaleza de este proceso paraeléctrico es similar a la que se observa en el material sin estructurar.

Aplicación de técnicas con luz sincrotrón para estudiar los fundamentos y homogeneidad de LIPSS en polímeros

Se ha realizado un mapeo preciso del orden estructural de LIPSS en policarbonato mediante la dispersión de rayos X a ángulos bajos con un haz micrométrico (μ GISAXS). La combinación con el modelado de los datos de GISAXS e imágenes de AFM ha permitido la evaluación de los efectos en la formación de LIPSS de las inhomogeneidades en la distribución espacial de la energía del láser, puesto que se ha mapeado con resolución micrométrica la evolución del periodo y del grado de orden estructural de los LIPSS a lo largo del diámetro del láser.

La formación de los LIPSS en películas poliméricas se ha seguido situ mediante GISAXS utilizando luz sincrotrón. Las muestras se irradiaron a diferentes frecuencias de repetición que van desde 1 hasta 10 Hz utilizando el cuarto armónico de un láser Nd: YAG (266 nm) con pulsos de 8 ns. Simultáneamente, los patrones GISAXS fueron adquiridos durante la irradiación láser. La variación de la señal GISAXS con el número de pulsos y el periodo de los LIPSS revela aspectos cinéticos clave del proceso de formación de las nanoestructuras. Los resultados obtenidos apoyan y dan información sobre la existencia de un mecanismo de retroalimentación para la formación de LIPSS en películas de polímero.



Secuencia de GISAXS adquiridos in situ en función del tiempo y el número de pulsos para una película delgada de PTT irradiada con láser a una frecuencia de repetición de 5 Hz.

CONFINAMIENTO ESTRUCTURAL Y PROPIEDADES ELECTRICAS EN MEZCLAS DE POLIMEROS CONJUGADOS CON APLICACION EN CELDAS SOLARES ORGANICAS

Se ha observado un fuerte impacto de la morfología de los cristales en la movilidad de huecos debido a la competencia entre la separación de fases y el confinamiento estructural en heterouniones de P3HT / PCDTBT. Encontramos que los tamaños de dominio de ambos componentes disminuyen a medida que disminuye el espesor de la película, lo que sugiere un escenario ventajoso inicial para la eficiencia de las células solares de heterounión masiva. Sin embargo, las películas de P3HT / PCDTBT (1: 1) con un espesor de 165 nm y más gruesas presentan una morfología similar de cristales tipo aguja en las películas de 58 nm de espesor no hay evidencia de esa morfología cristalina, lo que indica una inhibición de la cristalización debido a que los dominios de P3HT son tan sólo de 40 nm de espesor en la muestra más delgada. Los estudios estructurales se correlacionaron con las medidas de transporte de carga en la nanoscala mediante C-AFM. Hay un aumento significativo de la movilidad de huecos a campo cero para las películas de P3HT / PCDTBT con el aumento del espesor. Aún más interesante es el hecho de que se observa un aumento de la movilidad de huecos campo cero de aproximadamente dos órdenes de magnitud para los dominios de P3HT en una película de la mezcla de 165 nm en comparación con una película P3HT pura, con espesor similar. Esta observación está relacionada con la red de alta conductividad inducida en P3HT por la presencia de la fase PCDTBT, que consiste en cristales en forma de aguja que crecen de los dominios de P3HT y que actúan como puentes a través de los dominios PCDTBT.

DINÁMICA EN CONDICIONES DE CONFINAMIENTO EN MATERIA CONDENSADA BLANDA Y POLIMÉRICA

“Jamming” en materiales poliméricos : Espectroscopía de Fotocorrelación de rayos X

Se ha continuado con el estudio de geles nanocompuestos con partículas de óxido de hierro, en colaboración con el grupo de la Prof. C. Mijangos, mediante una técnica novedosa como es la espectroscopía de fotocorrelación de rayos X con luz de sincrotrón. En concreto, se ha estudiado el proceso de deshinchamiento de hidrogeles interpenetrados de alginato de sodio poli(N-isopropilacrilamida) con contenido de partículas de óxido de hierro. Mediante experimentos en función de la temperatura se ha observado que los hidrogeles presentan una dinámica hiperdifusiva, de manera similar a los aerojelos estudiados en el pasado. Dicha dinámica es atribuida a la estructura porosa característica de estos sistemas.

Dinámica y cristalización en películas delgadas de polímeros.

Se ha continuado la colaboración con el Dr. Simone Napolitano, de la Université de Llibre de Bruxelles, y en concreto se ha estudiado la dependencia con el espesor de las temperaturas de las diferentes transiciones (transición vítreo, cristalización y fusión) en películas delgadas de ácido poliláctico depositado sobre substratos sólidos. Los resultados obtenidos nos han permitido proponer parámetros que describen la estabilidad del vidrio polimérico así como su capacidad formadora de vidrio. Este último aspecto se ve fuertemente afectado por el espesor de la película, mientras que el primero no. Los resultados se han interpretado considerando los cambios en volumen libre del polímero en las zonas cercanas a los soportes sólidos.

DESARROLLO DE NUEVOS MATERIALES COMPUESTOS BASADOS EN PTT Y COPOLÍMEROS DE PTT-PTMO CON DIFERENTES ADITIVOS DERIVADOS DEL CARBONO

Se ha llevado a cabo un extenso estudio de diferentes compuestos poliméricos basados en poli(trimetilén tereftalato) (PTT) y sus copolímeros con poli(óxido de tetrametileno) (PTT-PTMO) con diferentes nanoaditivos basados en carbono como son los nanotubos de carbono de pared sencilla (SWCNT) o múltiple (MWCNT), grafito expandido (EG) y nano placas de grafeno (GNP).

Se han preparado muestras con diferentes composiciones y se ha llevado a cabo el estudio de sus propiedades térmicas (DSC), caracterización estructural (WAXS) y estudio de propiedades eléctricas (BDS). Asimismo, se han obtenido nanocompuestos mediante la combinación de aditivos con diferente dimensionalidad esto es, sistemas híbridos formados por SWCNT (1D) y GNP (2D) en los que se ha podido constatar una sinergia entre ambos aditivos.

NUEVOS POLÍMEROS BIODEGRADABLES

Hemos acometido un estudio sobre dos nuevos tipos de polímeros biodegradables: 1) poli(propilen 1,4-trans-ciclohexano dicarboxilato) (PPCE), poli(neopentil 1,4-trans-ciclohexano dicarboxilato) (PNCE) y sus copolímeros; y 2) terpolímeros ABA, donde A = poliácido láctico y B = copolímero formado por poli(propilen/neopentil succinato).

Ambos tipos de polímeros resultan ser muy interesantes para aplicaciones en las que se requieran propiedades biodegradables y que pueden ir desde empaquetado a biomedicina. El proyecto constituye un trabajo de investigación básica con el objetivo de profundizar en el conocimiento de los fenómenos de nanoestrucción de polímeros semicristalinos. En este contexto, se espera que los resultados tenga un importante impacto en la manufactura de filmes y fibras poliméricas biodegradables.

Grupo de BIOFÍSICA DE SISTEMAS MACROMOLECULARES (BIOPHYM)

SIMULACIÓN DE SISTEMAS MACROMOLECULARES SINTÉTICOS

Efecto de la ramificación de cadena corta en la conformación y dinámica molecular

Hemos realizado simulaciones mediante dinámica molecular de la conformación macromolecular y de la dinámica del fundido para polímeros modelo de diferentes pesos moleculares. Los modelos seleccionados son polibutadienos hidrogenados con un contenido del 2 % de ramas etilo (PEB2) y polietileno lineal (PE). Se ha demostrado que tanto la densidad como la rigidez de la cadena están afectadas por el peso molecular y por la presencia de ramas. Además, los resultados obtenidos de los tamaños moleculares y de la dinámica de la cadena concuerdan perfectamente con los experimentos de dispersión de neutrones existente en la literatura para el PEB2. Hemos observado una clara contracción de las cadenas y una dinámica más lenta para el PEB2 respecto al PE del mismo peso molecular. Usando las definiciones de Likhtmann-McLeish, se han obtenido los valores de tiempo de relajación entre enmarañamientos (τ_e) y del diámetro del tubo (a) usando las simulaciones que concuerdan con los datos experimentales disponibles (reología y dispersión de neutrones). Finalmente, se ha encontrado un excelente acuerdo entre los coeficientes de difusión experimentales y simulados en función del peso molecular. Por lo tanto, existe una clara diferencia entre los resultados

obtenidos para el PEB2 y el PE, debido a la presencia de las ramificaciones cortas, lo que ha servido para aclarar los resultados experimentales existentes en la literatura.

Transiciones de fase en polímeros mediante dinámica molecular

Los materiales poliméricos revelan interesantes fenómenos físicos en un amplio intervalo de longitudes de escala que van desde los sub-nanómetros a las micras o en la escala de tiempos desde los pico-segundos hasta los días. Para cubrir el estudio de estos intervalos es necesario el uso de técnicas experimentales avanzadas en combinación con herramientas computacionales complementarias. En este marco, los avances en el poder computacional, tales como el uso de procesadores GPU, y en las metodologías, permiten de forma eficaz encarar problemas clásicos y establecer un punto de unión entre los experimentos y la teoría. Hemos realizado simulaciones para capturar el comportamiento complejo de los procesos de transición vítrea y de cristalización a diferentes velocidades de enfriamiento. Las siguientes conclusiones se pueden obtener de las simulaciones realizadas: i) La transición vítrea aparente y su dependencia con la velocidad de enfriamiento están bien descritas en las simulaciones. Los valores extrapolados son muy cercanos a aquellos obtenidos para el polietileno totalmente amorfos sin interacciones de la fase cristalina (Ecuación Grodon-Taylor), b) por primera vez se ha usado el campo de fuerzas TraPPE-UA para simular las fases iniciales de la cristalización homogénea de un alcano enmarañado. Los hallazgos experimentales se describen correctamente en las simulaciones, entre otros: i) la longitud del plegado inicial para altos superenfriamientos y ii) la segregación de los sistemas en capas ordenadas y amorphas alternadas.

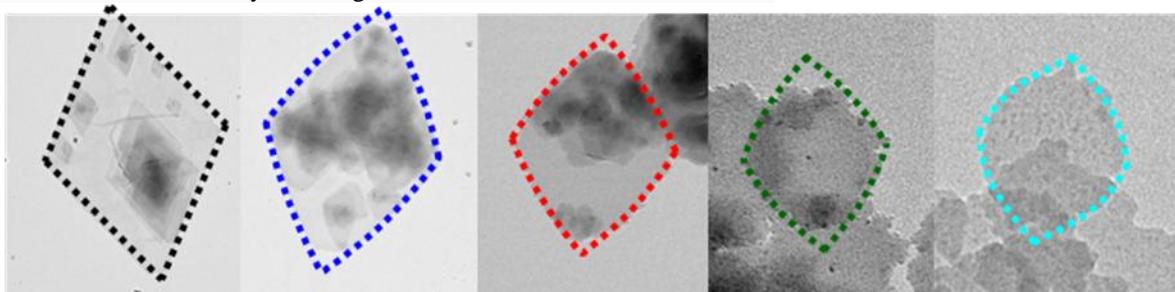
MOVILIDAD, ORDEN Y NANOESTRUCTURA EN SISTEMAS MACROMOLECULARES

El efecto de la ramificación de cadena corta en la miscibilidad de mezclas

Se ha llevado a cabo el estudio de las propiedades físicas de modelos moleculares de poliolefinas y de sus mezclas tanto en el estado fundido como en el estado sólido, en el marco de colaboraciones con distintos grupos de investigación, a nivel industrial (Dow Chemicals) y académico. Se ha investigado la influencia de la arquitectura molecular en la miscibilidad de poliolefinas de interés industrial. Las medidas reológicas y diversos tratamientos de los resultados basados en modelos físicos ponen de manifiesto el papel de la ramificación de cadena corta en la miscibilidad de las mezclas, y por tanto en las propiedades finales. En general se encuentra que las mezclas de polietileno de baja densidad y de polietileno lineal de baja densidad son inmiscibles para contenidos de ramificación bajos. La miscibilidad entre los componentes se produce a contenidos elevados de ramificación, sugiriendo un fuerte efecto del estado conformacional de las macromoléculas en el estado de mezcla.

El efecto de la ramificación de cadena corta en el hábito cristalino del polietileno

Se ha estudiado el efecto sistemático de la ramificación de cadena corta en el hábito cristalino del polietileno mediante TEM, calorimetría y rayos X abajo y altos ángulos. Se ha detectado un fuerte efecto de esta variable de ramificación en la estructura y la morfología de monocrystalines y se ha comunicado, por primera vez, la existencia de hábitos curvos en el polietileno de alto peso molecular (ver secuencia de micrografías). Esta es la primera vez que se observa este fenómeno en polietileno de alto peso molecular y abre la posibilidad de estudiar estos inusuales hábitos en polímeros de alto peso molecular. La curvatura puede ser explicada debido a un incremento continuo en la relación entre la velocidad de nucleación y la de propagación del frente, que está de acuerdo con un retardo de la propagación inducido por la presencia de ramificaciones y la consiguiente formación de diferentes nichos.



Secuencia de micrografías del hábito cristalino obtenido en una serie de polietilenos con contenido en ramificación creciente (entre 0 y 10 ramas / 1000 átomos de carbono, de izquierda a derecha) a subenfriamiento constante. La línea de puntos es el ajuste al modelo de Shcherbina y Ungar para el crecimiento de un frente asimétrico.

Efecto de nanotubos de carbono en las propiedades viscoelásticas de poli- ϵ -caprolactona

Se ha llevado a cabo el estudio de las propiedades físicas de poli- ϵ -caprolactona y de nanocompuestos con nanotubos de carbono, tanto en el estado fundido como en el sólido, en el marco de la colaboración con el Prof. A.J. Müller (IKERBASQUE). Se ha estudiado el efecto sinético causado por los nanotubos de carbono dispersos en la matriz polimérica. Las microscopías electrónica y de fuerzas atómicas demuestran una excelente dispersión de los nanotubos. Las propiedades reológicas y calorimétricas han resultado ser muy dependientes del contenido en nanotubos, incluso para contenidos tan bajos como del 0.25 %, para los que ya se alcanza la percolación.

SIMULACIÓN DE SISTEMAS MACROMOLECULARES BIOLÓGICOS

Análisis Conformacional de tripéptidos GXG (X=D,N,C)

El conocimiento de las preferencias conformacionales de tripéptidos es un punto clave en la comprensión de los estados iniciales del proceso de plegamiento de las proteínas y finalmente de la estructura terciaria de las mismas. Aminoácidos con cadenas laterales cortas y polares como el ácido Aspártico (D), Asparagina (N) y Cisteina (C) son habituales de las formaciones en las formaciones de tipo bucle en las estructuras proteicas. Por esta razón han sido investigados en condiciones controladas como tripéptidos GXG, donde G es el aminoácido Glicina. Los experimentos muestran cierta controversia respecto a la población relativa de las principales conformaciones. Nuestro objetivo es contribuir a la aclaración de este punto mediante la determinación teórica de las constantes de acoplamiento J de RMN y espectroscopía IR. Para estas tareas hemos usado modelos de la Teoría de Funcionales de la Densidad (DFT) que han sido bien contrastados en el campo del cálculo de propiedades espectroscópicas. Algunos resultados preliminares apuntan hacia una necesaria consideración de la dependencia de las constantes J respecto de los ángulos dihedros (ϕ, ψ) de la cadena principal.

Simulación de propiedades hidrodinámicas de complejos proteicos

El interés en determinar las propiedades hidrodinámicas de proteínas está conectado con el hecho de que su bioactividad se desarrolla generalmente en fase acuosa. El biosistema elegido es el complejo formado por el receptor del factor de crecimiento epitelial conocido como ErbB2 y el anticuerpo monoclonal denominado Trastuzumab. Este complejo tiene interés en los procesos de cáncer avanzado. En nuestro grupo venimos desarrollando un protocolo para calcular propiedades hidrodinámicas de dichos sistemas y compararlas con los datos experimentales que obtenemos en nuestro propio laboratorio. La metodología computacional consiste en realizar simulaciones de dinámica molecular a escala atomística para obtener estructuras representativas, seguidas de cálculos de propiedades hidrodinámicas en cada estructura mediante métodos de elementos de contorno (Boundary Elements). Las propiedades calculadas coinciden satisfactoriamente con los experimentos siempre que los modelos moleculares incluyan cierto grado de glicosilación en los correspondientes residuos Asparagina susceptibles a dicha reacción.

Simulación multiescala de complejos proteicos

El complejo biomolecular ErbB2-Trastuzumab es un sistema de muy alto peso molecular que puede resultar insuficientemente muestreado en simulaciones a nivel atomístico. Hemos desarrollado un protocolo para ampliar el espacio conformacional muestreado por simulación. En dicho protocolo se muestrea el modelo atomístico en un esquema de grano grueso que permite simulaciones de dinámica molecular más extendidas tanto en el espacio como en el tiempo. Las estructuras resultantes de dichas simulaciones son sometidas a un muestreo inverso a detalle atomístico donde se realiza un proceso de refinado mediante simulaciones cortas de dinámica molecular.

HIDRODINÁMICA DE PROTEÍNAS Y COMPLEJOS BIOMACROMOLECULARES

El estudio de la estructura y propiedades de macromoléculas biológicas como las proteínas y otros complejos macromoleculares permite obtener información sobre su función en su contexto biológico. Con este fin, se han estudiado diferentes sistemas: (i) receptores del factor de crecimiento EGFR o ErbB, (ii) complejos de la cápsida vírica del HIV (proteínas gp); (iii) cápsidas virales sintéticas (VLPs); y (iv) reflectina y sus mutantes. Estos estudios se han realizado en colaboración con grupos nacionales (IQFR/CSIC) e internacionales (Sino Biological Ltd., Beijing). Gracias a ellos estamos aportando información sobre la capacidad de formar complejos con anticuerpos utilizados en el tratamiento del cáncer como el Trastuzumab (en el caso de las proteínas EGFR), sobre la flexibilidad de los complejos (en el caso de las glicoproteínas de la membrana del HIV), sobre los procesos de maduración de las VLPs utilizadas por ejemplo como vehículos en terapias génicas, y en los procesos de autoensamblaje para la constitución de redes complejas (en el caso de los mutantes de reflectina).

CHAPTER 2B
RESEARCH ACTIVITIES

2B.1 THEORETICAL PHYSICS AND CHEMISTRY DEPARTMENT

RESEARCH LINES:

- Gravitation and Cosmology.
- Theoretical Nuclear Physics: Structure and Reactions.
- Condensed Matter Theory.
- Atomic and Molecular Physics at very low temperatures.
- Theoretical Physical-Chemistry applied to Astrophysics and to the characterization of new materials.

RESEARCH SUBLINES:

- Classical and Quantum General Relativity.
- Quantum cosmology.
- Loop Quantum Gravity and Cosmology.
- Models of quantum gravity and multi-fractal geometry.
- Black holes.
- Quantum Field Theory.
- Mathematical Physics.
- Combinatorics.
- Electroweak processes in nuclei.
- Nuclear Structure from a selfconsistent correlated mean field approach.
- Three-body techniques in Nuclear Physics.
- Reactions of relevance in Nuclear Astrophysics.
- Mesoscopic and strongly correlated systems.
- Ultracold atoms and molecules in optical lattices.
- Quantum integrable models.
- Quantum transport and quantum chaos.
- Inelastic non-reactive collisions at low temperatures.
- Theoretical spectroscopy of molecular species relevant for astrophysics and atmosphere.
- Van der Walls interaction in ZIFs.

EMPLOYED TECHNIQUES:

- Theoretical and mathematical physics.
- Differential geometry of infinite dimensional manifolds.
- Computational methods.
- Selfconsistent mean field calculation techniques.
- Numerical methods to solve the Faddeev equations in coordinate space.
- Numerical methods to solve non linear couples equations.
- Description and computation of dimensions in fractal geometry.
- Hyperspherical Adiabatic Expansion Method.
- Highly correlated ab initio calculations.

RESEARCH ACTIVITY:

THEORETICAL PHYSICS: QUANTIZATION

Quantum cosmology, black holes, and fractals

We have further developed a characteristic research line of the department focused on the quantization of cosmological systems with inhomogeneities. More specifically, we have analyzed the application of the hybrid quantization formalism proposed by us to the study of cosmological perturbations. This formalism establishes a hierarchy in the quantum geometry phenomena, therefore allowing the combination of quantum cosmology techniques with more conventional methods typical of field theories in curved spacetimes. We have discussed in detail the consequences of the hybrid quantization for inflationary scenarios. Our quantization scheme extends the cosmological dynamics to a pre-

inflationary era when one would expect that quantum gravity effects were important. This allows us to compare theoretical predictions of quantum models with recent observations of the cosmic microwave background radiation. It is worth emphasizing that our study of a homogeneous and isotropic universe with a scalar field in the presence of perturbation is based on a formulation that is specially designed to preserve the covariance of General Relativity, because we describe the perturbations in terms of gauge invariants and never fix the gauge at the classical level. We have also carried on further investigations on the hybrid quantization of the Gowdy model, which is inhomogeneous but with symmetries in certain directions, so that the local degrees of freedom propagate on an anisotropic background. We have generalized the construction of approximate solutions to the Hamiltonian constraint with a matter content consisting of a scalar field. The solutions have a very interesting behavior as they represent states that are indeed inhomogeneous, but turn out to be approximate solutions of a homogeneous and isotropic cosmological model, with matter terms that may be given by any kind of perfect fluid (e.g. a cosmological constant) and with possible changes to the geometry, similar to those studied in modified theories of gravity, like $f(R)$.

Besides, with the aim of extending to fermionic fields previous results of our group about the uniqueness of the Fock quantization of fields propagating in curved spacetimes, we have investigated the case of a Dirac field on a homogeneous and isotropic cosmological background with space sections whose topology is the three-sphere. We have built an equivalence class of Fock representations that is selected by the criteria of possessing a vacuum that is invariant under the action of the isometry group of the cosmological background, and admitting a unitary implementation of the quantum dynamics.

There exist several proposals for regularizing the classical singularity of black holes so that their formation and evaporation do not lead to information-loss problems. One characteristic is shared by most of these proposals: These regularly evaporating black holes present long-lived trapping horizons. We have elaborated on an alternative regularization of the classical singularity, which leads to a completely different scenario. In our scheme the collapse of a stellar object would result in a genuine time-symmetric bounce, which in geometrical terms amounts to the connection of a black-hole geometry with a white-hole geometry. The duration of the bounce as seen by external observers is very brief. This scenario motivates the search for new forms of stellar equilibrium.

We have analyzed also the implications of the violation of the strong Huygens principle in the transmission of information from the early universe to the current era via massless fields. We show that much more information reaches us through timelike channels, and not mediated by real photons.

Moving particles outside a star will generally experience quantum friction caused by Unruh radiation reaction. There exist however radial trajectories that lack this effect. Along these trajectories, observers perceive just stellar emission, without further contribution from the Unruh effect. They turn out to have the property that the variations of the Doppler and the gravitational shifts compensate each other. They are not geodesics, and their proper acceleration obeys an inverse square law, which means that could in principle be generated by outgoing stellar radiation. In the case of a black hole emitting Hawking radiation, this may lead to a buoyancy scenario.

We have also investigated the cosmological constant problem, which can be understood as the failure of the decoupling principle behind effective field theory, so that some quantities in the low-energy theory are extremely sensitive to the high-energy properties. Following this intuition, we have considered a minimal modification of the structure of General Relativity which, as an effective theory, permits to work consistently at low energies, i.e., below the quantum gravity scale. This effective description preserves the classical phenomenology of General Relativity and the particle spectrum of the standard model, at the price of changing our conceptual and mathematical picture of spacetime.

An independent line of research has been the theoretical and experimental development of theories on multi-scale spacetimes, where geometry changes with the scale in a manner similar to that of multi-fractals. We studied for the first time the Standard Model of elementary particles both in the classical case and in its quantum aspects. After formulating the fundamental action in the electroweak and strong sectors of the theories with weighted and “q” derivatives, we have obtained for the first time observational constraints on the characteristic scales of the geometric measure, stemming from the mean lifetime of the muon and from the Lamb-shift effect in hydrogenic atoms.

Moreover, we have studied the spectral dimension (which indicates the number of effective dimensions felt by a test particle) in quantum gravities with discrete geometries, including spin foams, group field theory and loop quantum gravity. We have shown that the geometry of these theories is affected by the discrete and combinatorial structure so that the effective spacetime dimension changes with the scale and, in some cases, can be declared as fractal. This result allows one to pinpoint in a precise manner the scales starting from which one can define the classical limit.

Parametrized field theories with boundaries and gauge invariance

Quantum field theories in bounded spatial domains are important in several branches in theoretical physics reaching from the study of black holes to condensed matter systems. One of the outstanding features of general relativity is its

diffeomorphism invariance, a well-known source of conceptual difficulties and a standing roadblock in its consistent and successful quantization. Among the most popular ideas used to understand the issue of diff-invariance in field theories and probe possible approaches towards its resolution is the introduction of the so called parametrized models where embeddings play an important role as additional configuration variables. These can be used to avoid the introduction of particular foliations and somehow sidestep some of the issues related with the so called problem of time. The interactions between parametrization, the presence of spatial boundaries and gauge symmetries are quite intricate from the mathematical point of view and must be duly disentangled in order to get the Hamiltonian formulation for these models and approach their quantization. Two particular kinds of systems, that have somehow eluded a satisfactory treatment, have been considered by our group: the parametrized electromagnetic field (for which a partial, but not fully satisfactory treatment was provided by Kuchař and collaborators) and the parametrized scalar field in bounded spatial regions subject to Dirichlet, Neumann or Robin boundary conditions (considered by Marolf and collaborators but, again, only partially understood). By resorting to geometric Hamiltonian methods we have been able to obtain a complete and detailed Hamiltonian formulation for these models. The most striking and unexpected feature of this description is the appearance of “sectors” in the primary constraint hypersurface. These are associated with the fact that the (generalized) rank of the pullback of the symplectic form to it is not uniform. This can be seen to be related with a bifurcation of the Dirac algorithm that is traditionally used to deal with constrained/singular mechanical systems. The fact that systems for which this bifurcation takes place are usually discarded as unphysical is one of the reasons why they have not been considered in detailed and are deemed as pathological. The fact that, such natural models as the ones that we have looked at, display this type of behavior at their very core shows the need to approach them with new tools such as the ones that we have employed. The availability of these tools, honed with the study of the models mentioned above, opens up the possibility of studying more complicated systems (general relativity) and use their parametrized versions to approach some of the difficulties currently encountered by more popular approaches. Our hope is that we will be able to tackle some of them in the next months.

THEORETICAL NUCLEAR PHYSICS

Beta decay in deformed nuclei

One of the main issues studied along this year has been the beta-decay properties in various nuclear mass regions characterized by deformed ground states. First, we have studied medium-heavy neutron-rich isotopes including Ge, Se, Kr, Sr, Ru, and Pd isotopic chains. These nuclei are very interesting because they are involved in the astrophysical rapid neutron capture process (r process). The r process is believed to be the main responsible for the stellar nucleosynthesis of heavy elements leading to the production of heavy neutron-rich nuclei and for the existence of about half of the nuclei heavier than iron in the universe. The half-lives of these nuclei determine to a large extent the possible r -process paths, the isotopic abundances, and the time scales of the process. Although much progress has been done recently on masses and half-lives measurements, unfortunately most of the nuclear properties of relevance for the r process are experimentally unknown yet due to their extremely low production yields in the laboratory. Therefore, reliable nuclear models are needed to interpret the astrophysical observations and to model and simulate properly the r process. We have also studied half-lives and energy-distributions of the Gamow-Teller strength in neutron-deficient isotopes in the lead mass region (i.e., Pt, Hg, Pb). The interest here is to get insight into the possibility of fingerprints of deformation in the decay observables in such a way that one could learn about the nuclear deformation from the decay patterns observed. Our work has been used as a theoretical guide to understand the beta-decay of $^{190,192}\text{Pb}$ measured at CERN/ISOLDE. Finally, we have also studied double beta decay processes with two-neutrino emission. The calculations have been compared with the experimental information available on the single-beta decays of the two branches in the process, as well as with the experimental half-lives of the double-beta process. The final goal is to tune the theoretical models in order to account reliably for the neutrinoless process, not yet observed, which will provide valuable information about the neutrino nature and its absolute mass. Our theoretical model is a proton-neutron QRPA approach based on a self-consistent Hartree-Fock deformed mean field formalism with Skyrme interactions and pairing correlations in the BCS approximation. Residual spin-isospin interactions are also included in the particle-hole and particle-particle channels. The structural evolution in the various isotopes and their equilibrium shapes are obtained from their energy-deformation curves.

Continuum three-body wave functions: Resonances, decay modes and reactions

Generally speaking, our main goal is to contribute to the development of the different techniques that permit to investigate three-body systems, and to exploit them to study the structure and properties of light nuclei. A proper treatment of the long distance behavior of the three-body wave function is essential to understand how the resonances of systems like ^{12}C or ^9Be do actually decay. Another important topic under investigation is the low-energy nuclear reactions involving these nuclei. An important group of them are the radiative capture processes, which play a very important role in the stellar nucleosynthesis processes, in particular, in bridging the waiting points. We also investigate pure nuclear reactions, in particular the ones corresponding to a two-body projectile hitting a target. We exploit the

particularities of the adiabatic potentials to distinguish in a clean way between the different channels (elastic, inelastic or rearrangement).

More specifically, during the last months our work has been focused in two main issues: The first one concerns the triple-alpha process and its reaction rate at very low temperatures. The fact that at such low temperatures the energies involved are far below the lowest 0^+ resonance in ${}^8\text{Be}$ implies that a sequential description through that particular two-body resonance is not obvious. In fact we have found that a direct capture description of the process, without populating any intermediate two-body state, could increase the reaction rate by up to 7 orders of magnitude for a temperature of 10^7 GK. We have also studied bremsstrahlung cross sections, which is an essential issue to be understood in order to extend the same kind of analysis to the same gamma emission processes in a three-alpha system. The second main topic refers to the description of 1+2 reactions by use of the recently derived two integral relations. We have found the method to be very successful in order to describe processes below the two-body breakup threshold, not only for elastic processes, but also for inelastic and transfer reactions. Application of the same method for energies above the breakup threshold is the obvious next step. This has been achieved very recently, and in particular it has been applied to investigate neutron-deuteron collisions as well as reactions involving three ${}^4\text{He}$ atoms at very low temperatures, of the order of the K.

STRONGLY CORRELATED AND MESOSCOPIC SYSTEMS

Quantum transport

Chlorosomes are the main light-harvesting structures of green sulfur bacteria, some green filamentous anoxygenic phototrophs, and the recently discovered aerobic anoxygenic phototroph *Candidatus Chloroacidobacterium thermophilum*. The chlorosomes are self-assembled structures of hundreds of thousands bacteriochlorophyll (BChl) molecules. They differ from other light-harvesting complexes by the absence of a protein matrix which supports the photosynthetic pigments and their very large size with lengths up to 200 nm. Chlorosomes usually function in extremely low light conditions and are thus probably the most efficient light-harvesting antenna complexes in nature. These special properties make the chlorosome a potential candidate for use in biomimetic light-harvesting devices. We study the effect of disorder on spectral properties of tubular chlorosomes in green sulfur bacteria *Cf. aurantiacus*. Employing a Frenkel-exciton Hamiltonian with diagonal and off-diagonal disorder consistent with spectral and structural studies, we analyze excitonic localization and spectral statistics of the chlorosomes. A size-dependent localization-delocalization crossover is found to occur as a function of the excitonic energy. The crossover energy region coincides with the more optically active states with maximized superradiance, and is, consequently, more conducive for energy transfer.

Ultracold molecules

We have performed a comprehensive analysis of the spectral statistics of the molecular resonances in ${}^{166}\text{Er}$ and ${}^{168}\text{Er}$ observed in recent ultracold collision experiments [Frisch et al., Nature, 475 (2014)] with the aim of determining the chaoticity of this system. We calculate different independent statistical properties to check their degree of agreement with random matrix theory (RMT), and analyze if they are consistent with the possibility of having missing resonances. The analysis of the short-range fluctuations as a function of the magnetic field points to a steady increase of chaoticity until values of the magnetic field of approximately 30 G. The repulsion parameter decreases for higher magnetic fields, an effect that can be interpreted as due to missing resonances. The analysis of long-range fluctuations allows us to be more quantitative and estimate a 20-25% fraction of missing levels. Finally, a study of the distribution of resonance widths provides additional evidence supporting missing resonances of small width compared with the experimental magnetic field resolution. We conclude that further measurements with increased resolution will be necessary to give a final answer to the problem of missing resonances and the agreement with RMT. We expect that the analysis with combined tools performed here should become a standard approach for the statistical analysis of experimental spectra.

Quantum integrable models

The elliptic Gaudin model describes completely anisotropic spin systems with long range interactions. The model was proven to be quantum integrable by Gaudin and later the exact solution was found by means of the algebraic Bethe ansatz. In spite of the appealing properties of the model, it has not yet been applied to any physical problem. We generalize the exact solution of the elliptic model to systems with arbitrary spins, and develop numerical techniques to solve the set of non-linear coupled equations for the ground state and low energy excited states. We then describe numerically the behavior of the Bethe roots for a system with three different spins in the sectors of positive and negative parity. We demonstrate that the number of independent solutions equals the dimension of the Hilbert space and therefore, the exact solution is complete. Then, we propose an integrable anisotropic central spin (ACS) Hamiltonian that models the interaction of an electron with a quantum dot environment. We consider the hyperfine interaction between the electron spin and the nuclear spin of the environmental atoms, plus quadrupole corrections. We solve exactly the ACS model for long chains, and extrapolate the ground state energy to the large N limit, showing that it

coincides with the classical spin approximation in the thermodynamic limit. The first numerical studies of the elliptic model paves the way for numerical applications to other physical many-body systems.

Three-dimensional Dirac and Weyl semimetals

We have continued the investigation of the so-called three-dimensional semimetals, which is relevant for the description of a new class of recently discovered materials with linear electronic dispersion in all spatial directions. This includes the case of the three-dimensional Dirac semimetals, which have Dirac points hosting each of them fermions with the two different chiralities, as well as the case of the Weyl semimetals, which have Weyl points characterized by having a definite chirality. These materials have attracted much interest because of their potential to develop topological quantum states, which may support a new paradigm of electronic transport without dissipation.

We have studied in particular the interaction between light and matter in the three-dimensional semimetals, focusing on the investigation of the effects of circularly polarized electromagnetic radiation on the electron system. For that purpose, we have applied two different methods, consisting in the use of Floquet theory to obtain approximate solutions of the time-dependent Schrödinger equation, on one hand, and mapping that equation by means of an appropriate unitary transformation into a time-independent eigenvalue problem, on the other hand. Both approaches have allowed us to gain insight about the gaps that open up at particular points in the spectrum. Most interestingly, we have also seen that the light-matter interaction leads to the appearance of midgap states, which have the character of evanescent waves decaying from the surface of the semimetal exposed to the radiation.

We have established an interesting connection between the midgap evanescent states and the existence of so-called exceptional points in the hamiltonian describing the interaction between light and matter. In fact, the zero-mode evanescent states can be understood as branch points of the spectrum at which the gap closes, for momenta inside the complex plane. This endows the zero-mode surface states with a novel mechanism of topological protection, since the branch cuts cannot be undone unless the branch points coalesce in pairs. We have seen that these novel surface states have in general a large degeneracy proportional to the area of the irradiated surface and the amplitude of the radiation field. This may give rise to the development of a flat band of localized states, providing an alternative to the usual Landau quantization in which the role of the magnetic field is here replaced by the radiation field.

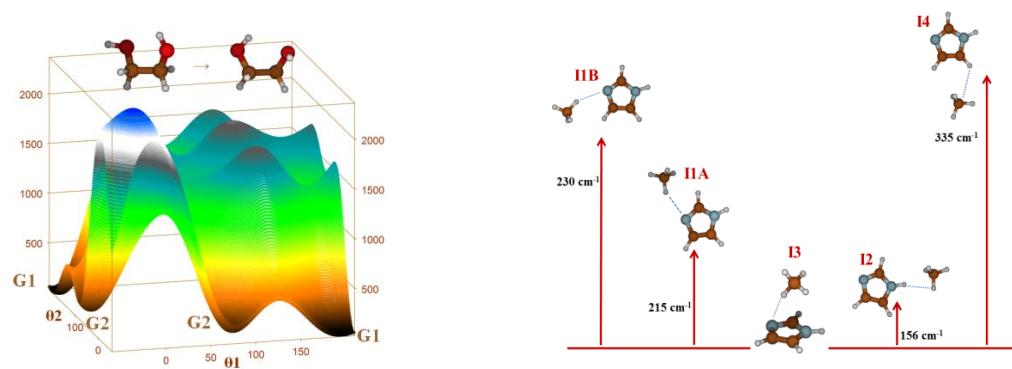
We have shown that the genuine feature of the midgap surface states is that they all carry angular current, with the same chirality of the photon polarization, leading to a rotation of their charge which is synchronized with that of the radiation fields. This must lead to the observation of a macroscopic chiral current across the surface exposed to the radiation, demonstrating a novel mechanism for the transfer of radiation energy driving directly the rotation of the quantum states in the electron system.

THEORETICAL PHYSICAL-CHEMISTRY APPLIED TO ASTROPHYSICS AND TO THE CHARACTERIZATION OF NEW MATERIALS

The research group employs highly correlated ab initio methods to characterize molecular species and chemical processes of astrophysical interest, as well as, to describe new materials with application to CO₂ capture and storage.

During the year 2015, we have performed studies of molecular systems of astrophysical interest within 2 sub-lines of research: molecular spectroscopy of non-rigid prebiotic molecules, structural and spectroscopic characterization of semi-rigid species and determination of properties in non-reactive inelastic collisions at very low temperatures. Always we use as a basic tool, high-level ab initio methods to determine molecular structures and potential energy surfaces. Based on these tools and using our codes ENEDIM and FIT-ESPEC, rovibrational spectroscopic properties are predicted. All systems are of interest for the study of the chemical properties of circumstellar and interstellar gas phase regions and planetary atmospheres.

Since 2004, we have made very detailed and comprehensive studies aimed to the characterization of carbon chains of astrophysical importance gradually increasing the complexity of the systems. These chains are considered relevant isolated species and intermediates of formation processes of large molecules such as PAHs and Fullerenes. Very accurate methods have been used to characterize small chains. Initially we studied pure chains type C_n with a reduced number of atoms (4, 5) which have no permanent dipole moment and are likely to be detected with infrared techniques. In the far infrared region, they can be seen through their bending modes. During 2014, we have carried out an exhaustive study of the neutral, anionic and cationic forms of C₆N in collaboration with researchers from the University of King Saud of Ryad. In collaboration with the Laboratory of Astrophysics of the Rennes Institute of Physics we explored anions of small carbon chains. These species of low stability have permanent dipole moment and therefore are observable through radio astronomy. Taking into account the evolution of the electronic states of low energy throughout the processes of formation and destruction, we have proposed a general rule that predicts the detectability of anions in astrophysical sources. For all the studied carbon chains, we have characterized structures and potential surfaces for the first electronic states, as well as rovibrational properties including anharmonic effects. We predicted possible channels of isomerization, conical intersections and rovibronic effects.



The new radioastronomical observatories will allow the detection of new molecules and new isotopic varieties if their rotational spectra in the millimeter and sub-millimeter regions are recorded and analyzed at the laboratory level. Highly correlated ab initio calculations allow determine molecular structures, as well as to obtain initial sets of spectroscopic parameters that can facilitate the assignments of these spectra. Special interest show the calculation aimed to the spectroscopic characterization of non-rigid prebiotic species that present vibrational levels likely to be populated at very low temperatures. These are suitable of been detected in vibrational excited states in star formation areas. During 2015, especial attention was given to organic species that present intramolecular hydrogen bonds, like as ethylen-glycol. In colaboration with researcherhs of the University of Lille we are performing studies on molecules containing nitrogen atoms and carbonyl groups (like as acetone and dimethyl carbonate).

Finally, within the environment of Marie Curie FP7-CAPZEO action, we are conducting studies of the interaction of CO₂ and water with imidazoles. The aim is to predict the ability of materials type ZIF (Zeolitic Imidazolate Frameworks) for the caption and storage of atmospheric species. Molecular calculations (interaction potentials and structures) take advantage in future studies of simulation of solids. During 2015, we emphasized on the problem of the competition between CO₂ and other greenhouse effect gases (SF₆, CH₄) for their capture in ZIF's.

2B.2 NUCLEAR, VIBRATIONAL AND DISORDERED MEDIA SPECTROSCOPY DEPARTMENT

RESEARCH LINES:

- Experimental Nuclear Physics.
- Study of excited states and nuclear resonances.
- Nuclear Structure studied in reactions with stable and exotic nuclei at low, medium and relativistic energies.
- Computing simulations using R3BRoot for nuclear physics experiments.
- Systems devoid of long-range order.
- Advanced instrumentation.
- Surface Spectroscopies.
- Biospectroscopy.
- Nano-Photonics.
- Plasmonics and Metamaterials.
- Chemical-Physics of Deposition and Ablation Processes.
- Biological applications of vibrational spectroscopy.

RESEARCH SUBLINES:

- Experimental studies of light nuclei close to and beyond the driplines.
- Beta decay studies of dripline nuclei.
- Study of the nuclear break up mechanism by multiparticle detection.
- R&D for FAIR (Facility for Antiprotons and Ion Research).
- Study of the structure and dynamics of halo nuclei.
- Direct nuclear reactions.
- Magnetic moment measurements in exotic nuclei using radioactive ion beams.
- Nuclear Instrumentation.
- Computing tools in Experimental Nuclear (R3BRoot).

- Data Analysis tools.
- Nuclear Physics experiments for FAIR.
- Physical behavior at nano-scales.
- Microscopic structure and dynamic of disordered condensed matter.
- Advanced instrumentation development for neutron sources.
- Laser Induced Breakdown Spectroscopy (LIBS).
- Surface-enhanced (SEVS) on metal nanostructures.
- Vibrational Spectroscopy applied to Cultural Heritage.
- SEVS applied to pollutant detection.
- Applications of SERS to biology: drug/biomolecule interaction.
- Plasmonics in metal nanostructures.
- Semiconductor Nanowire Photonics.
- Plasmon resonances on metal nanostructures (Nanoantennae): Raman and Fluorescence.
- Metamaterials with HRI dielectric materials.
- Semiconductor Nanowire Photonics.
- Infrared Laser Induced Ablation Plasmas.
- Laser Induced Breakdown Spectroscopy in Laser Induced Plasmas.
- Detection of infrared and Raman spectroscopic markers for diagnosis of neurodegenerative and neoplastic diseases.
- Molecular structure of proteins and lipids in functional food.
- Nanostructure of Artificial Building Conglomerants.

EMPLOYED TECHNIQUES:

- Beta decay studies at ISOL facilities, ISOLDE and REX-ISOLDE@CERN.
- Reaction studies at low energy at the 5MV accelerator CMAM@UAM.
- Reaction studies at relativistic energies, the R3B experiment at GSI.
- GEANT4 Monte Carlo simulation of experimental set-up and detectors.
- Electronic and mechanical design of experimental set-up.
- Mathematics and computing methods.
- Analysis of experiments in experimental nuclear physics.
- Numerical simulation.
- Neutron Scattering.
- Calorimetric techniques.
- Gas adsorption techniques.
- Absorption techniques.
- IR Spectroscopy (Normal, FTIR, micro IR and SEIR).
- Visible-UV Spectroscopy.
- IR and Raman Spectroscopy of two dimensional correlations by H/D isotopic exchange.
- Fluorescence Spectroscopy.
- Transmission and Scanning Electron Microscopy (TEM, SEM).
- Theoretical Physics: Classical Electrodynamics.
- Theoretical and mathematical physics.
- Infrared Spectroscopy
- IR Spectroscopy (FTIR).
- Laser Induced Breakdown Spectroscopy (LIBS).
- Raman Spectroscopy
- Optical Emission Spectroscopy (OES).
- Laser Induced Fluorescence (LIF).
- Laser Physical Deposition (LPD).
- Multivariate Statistical Analysis.
- Time- and space-resolved Imaging techniques.

RESEARCH ACTIVITY:

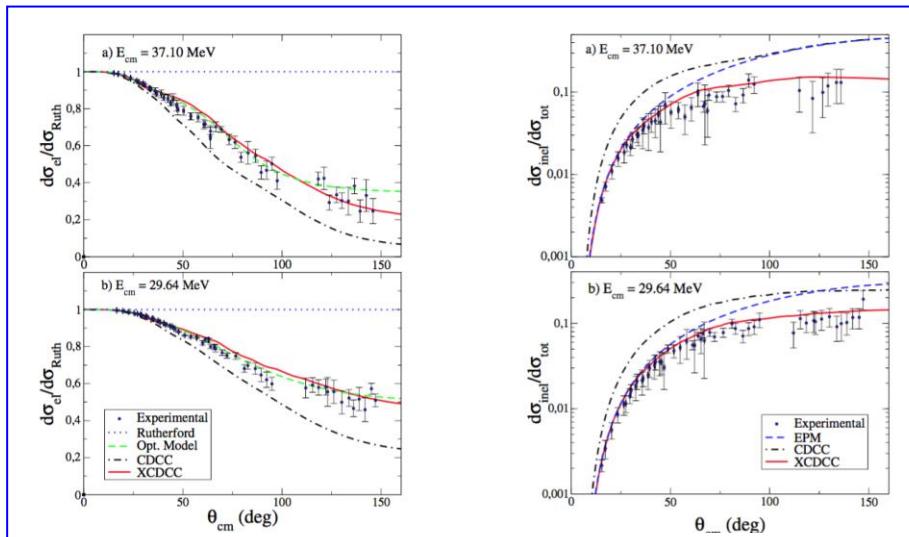
CHARACTERIZATION OF NUCLEAR STATES AND RELEVANT REACTIONS IN STELLAR NUCLEO-SYNTHESIS PROCESSES

EXPERIMENT S1202: EXPLORING HALO EFFECTS IN THE SCATTERING OF ^{11}Be ON HEAVY TARGETS (Project FPA2012-32443, Predoc on contract Vicente Pesudo, Angel Perea, Olof Tengblad)

A halo configuration is an exotic distribution of the nuclear matter observable in some nuclei with low nucleon separation energy (i.e. close to the neutron or proton driplines). The structure is formed when one or two weakly-bound nucleons are dominantly in an s-wave (or p-wave in some rare cases). Due to the weak attraction and the low centrifugal barrier, the wave functions of these nucleons have a tail that extends to large radii. Reactions of halo nuclei at energies around the Coulomb barrier shed light on the dynamics of the reaction process and the use of heavy targets in this regime reinforces the role of Coulomb interaction, compared to the nuclear interaction.

Vicente Pesudo has finished the analysis of the experiment S1202: $^{11}\text{Be}(^{197}\text{Au}, ^{197}\text{Au})^{10}\text{Be} + \text{n}$ reaction at energies around and below the Coulomb barrier, he has been able to extract valuable experimental data in all the angular range from 13° to 150° .

The study of the cross section for this nuclear reaction has been the thesis topic of Vicente Pesudo titled “**Analysis of the one neutron halo nucleus against a heavy target at energies around the coulomb barrier: the case of ^{11}Be on ^{197}Au** ”, which he defended 19th of June 2015 at the University of Complutense.

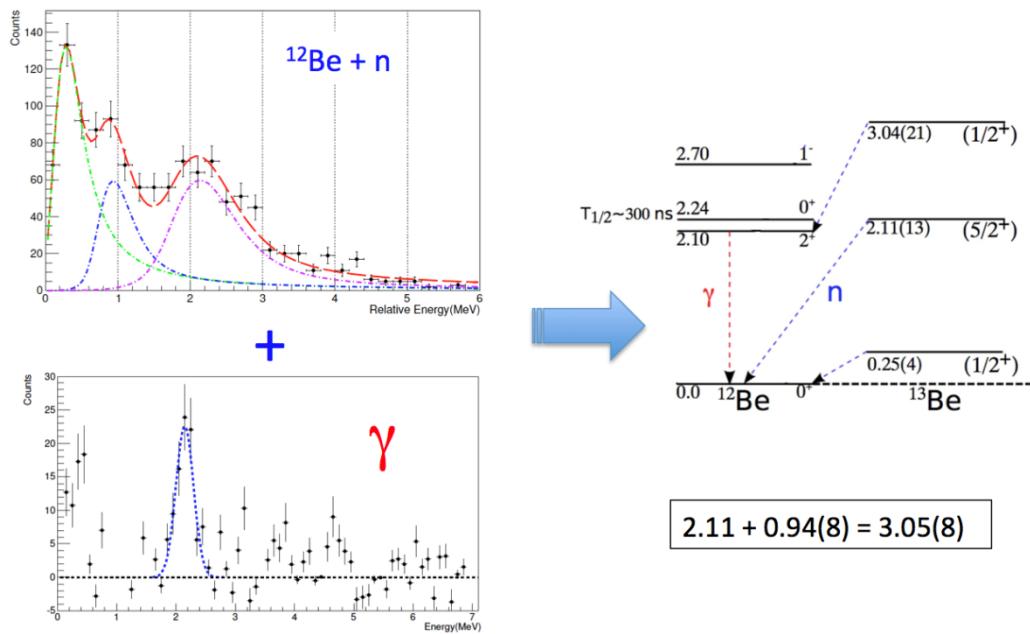


The figure shows the interaction cross sections of ^{11}Be on ^{197}Au at $E_{\text{cm}} = 37.10$ MeV (a) and 29.64 MeV (b) compared with different theoretical calculations. To the left is shown the Elastic scattering and to the right the inelastic scattering probability. There is a significant deviation from Rutherford in all the angular range, even where Coulomb interaction dominates, showing the importance of the E1 transition in the collision process. In both cases the XCDCC calculation explains the data.

EXPERIMENT S393 R3B@GSI: STUDY OF NEUTRON RICH NUCLEI BEYOND THE DRIP-LINE (Project FPA2012-32443, PhD student FPI2010 G. Ribeiro, Enrique Nácher, Olof Tengblad)

The aim of this work has been to determine the shell structure of ^{13}Be , a neutron-rich unbound nucleus, using a knockout ($p, 2p$) reaction. This Beryllium isotope has been controversial over the last years, being the target of several studies due to its interest as the middle step between the ^{14}Be Borromean nuclei and its core ^{12}Be . Studying this nucleus has been complicated due to the difficulties to unambiguously determine some of the resonance positions because of the inability of the analysis method (invariant mass) to make a difference between the decays of ^{13}Be to excited states or ground state of ^{12}Be . In order to avoid these ambiguities it is necessary to measure in coincidence the emitted gamma rays from ^{12}Be excited states.

The study of this kind of nucleus gives information about the exotic phenomena that appear at the borders of the nuclei chart, like the unbound states, halos and new magic numbers. These has been the thesis work titled “Studies beyond the neutron dripline using Quasifree (p,2p) reactions: The case of ^{13}Be ” by Guillermo Ribeiro that was defended the 3rd of July 2015 at the University of Complutense de Madrid.



The presence of a coincidence between the 2.1 MeV gamma ray and a peak in the relative energy at 0.9 MeV makes evident that there is a resonance of ^{13}Be that decays to the 2.1 MeV ^{12}Be state. Thus we consider the peak of the relative energy spectrum located at ~ 0.95 MeV as coming from a resonance state at 2.1 MeV + 0.95 MeV $\simeq 3.05$ MeV.

IS577 EXPERIMENT: NUCLEAR STRUCTURE STUDY OF ^{31}Ar AT ISOLDE

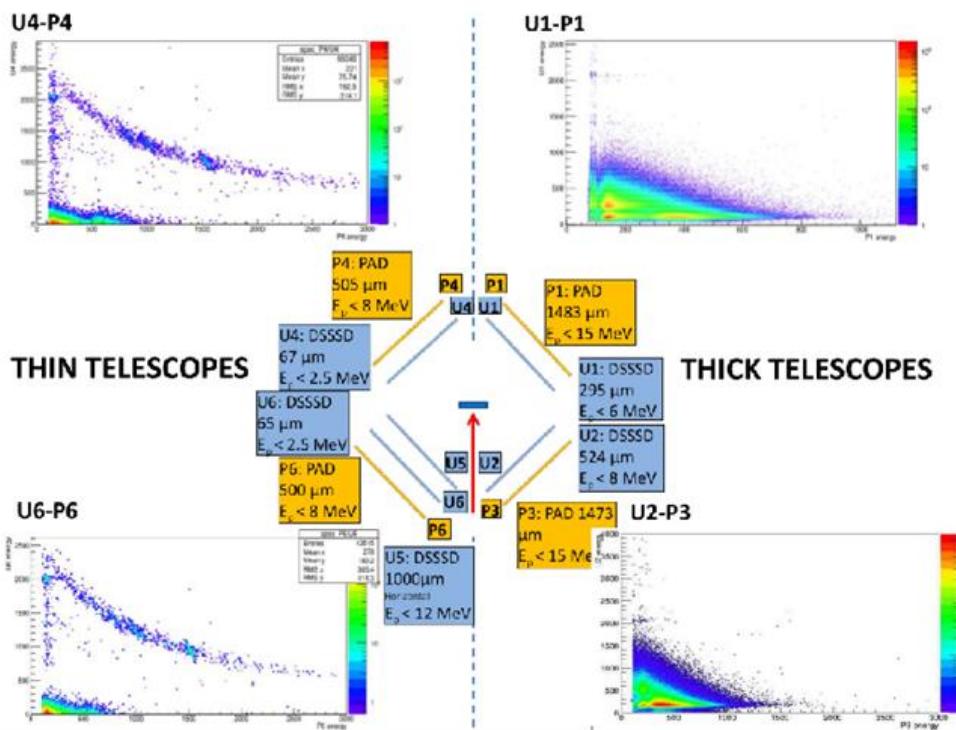
(FPA2012-32443 Project, PhD student FPI2013 Irene Marroquín, Olof Tengblad, Enrique Nácher, Ángel Perea)

β -delayed proton emission consists in the emission of protons following the de-excitation of resonant states populated in the β -decay of exotic nuclei, near the proton drip-line. Drip-line nuclei have large Q_β values and therefore high-lying unbound states are accessible. In the case of ^{31}Ar , many decay channels are open: $\beta\gamma$, βp , $\beta p\gamma$, $\beta 2p$, $\beta 2p\gamma$, $\beta 3p$ and perhaps also $\beta 3p\gamma$. The nucleus ^{31}Ar has been studied in previous experiments at GANIL and at ISOLDE. However, the $\beta 3p$ branch has been observed only with limited statistics and $\beta 3p\gamma$ remains unobserved.

In order to measure these decay-channels, the international MAGISOL collaboration (Madrid-Aarhus-Goteborg) performed a new experiment using a compact set-up optimized for multi-particle emission at the ISOLDE Decay Station (IDS), CERN, Geneva, Switzerland.

The IDS is a new initiative to have a permanent station dedicated to β decay studies allowing to measure with high efficiency γ -rays and charged particles. Our collaboration installed a new detection chamber; the MAGISOL Si-Plugin Chamber, consisting of an array of 5 Double-sided Silicon Strip Detectors (DSSD) backed by unsegmented silicon-pad detectors (PAD) in ΔE -E configuration for β and charged particle detection. This Si-array detects multi proton emission over a wide energy range with the good energy (25 KeV) and it comprises 1280 pixel detectors (5x5 cm, 16x16 strips) resulting in an angular resolution of (3°) needed to characterize the different proton-emission channels of ^{31}Ar . To complete the set-up, High-Purity Germanium (HPGe) clover detectors surround the chamber to provide high γ -ray detection efficiency.

The PhD thesis of Irene Marroquín is focused on the preparation, participation and analysis of this experiment.



Array of detectors DSSSD (U1-U6) and PAD (P1-P6) used in the experiment with indications of thickness and required punch-through energy for protons. On the side to each telescope, the corresponding 2-dimensional spectrum ΔE-E is shown.

GANAS - GAMMA & PROTON DETECTION WITH NEW ADVANCED SCINTILLATORS (<http://www.iem.cfmac.csic.es/departamentos/nuclear/GANASwebpage/html/>)

(Proyecto GANAS: ERANET NupNET PRI-PIMNUP-2011-1333, E. Nácher, O. Tengblad, A. Perea, A. Garzón)

A high-resolution scintillator array for the detection and spectroscopy of gamma rays and protons of high energy has been constructed: CEPA4. It is made of four individual phoswich modules based on the optical coupling of 4 cm of LaBr₃(Ce) to 6 cm of LaCl₃(Ce). The detector response to medium and high energy protons has been measured at the CCB cyclotron facility in Cracow Poland. For the first time we have demonstrated that we can reconstruct the incident energy of the protons even if they have sufficient energy to punch through the entire length of the crystal. In this context we have measured an energy resolution of 7% for 220MeV protons. This detector, although built as a prototype towards the final design of CALIFA at R³B-FAIR, it might find its own applications in experiments investigating β-decay as well as low- energy reactions with radioactive beams due to its high performance in gamma-ray and proton spectroscopy.

Furthermore, the authors are exploring its applications to medical physics, in particular to perform high-accuracy dosimetry in hadron-therapy with ¹²C beams as well as proton tomography. The work was published as; "Proton response of CEPA4: A novel LaBr₃(Ce)-LaCl₃(Ce) phoswich array for high-energy gamma and proton spectroscopy" Nuclear Instruments & Methods A769, 105-111,(2015).

DECAY SPECTROSCOPY WITHIN THE EURICA PROJECT AT RIKEN (JAPAN)

(Proyecto FPA2011-29854-C04-01, Andrea Jungclaus, Jan Taprogge)

MAGNETIC MOMENT MEASUREMENT WITH EXOTIC THE NEUTRON RICH ION BEAMS AT REX-ISOLDE

(FPA2009-13377-C02-02 y FPA2011-29854-C04-01 Andrea Jungclaus, Andres Illana, Angel Perea)

INBEAM GAMMA-RAY SPECTROSCOPY WITH THE DALI2 SPECTROMETER AT RIKEN (JAPAN)

(Project FPA2011-29854-C04-01 Andrea Jungclaus, Enrique Nácher)

PHYSICAL BEHAVIOR AT NANO-SCALES

Probably molecular hydrogen (H_2) is the most obvious candidate to replace the fossil fuels as an energy vector environmentally neutral. A safe and efficient H_2 storage presents, however, a series of unsolved technological challenges. One possible solution is the adsorption of H_2 at low temperatures in light nanostructured materials. However, practical limitations impose a minimum temperature of 77 K (air liquid temperature) and a maximum pressure around 50 atmospheres. These are very challenging thermodinamical conditions. Above 33 K molecular hydrogen is in a supercritical state, that is, it is a fluid than cannot be condensed. In other words, the thermodynamic state is such that weak (dispersive) interactions, i.e., interactions comparable to those acting between the molecules themselves so that there is not a breakdown of the chemical molecular bond (chemisorption), it is not possible to retain a substantial quantity of molecules on the adsorvent substrate.

By means of a concurrent use of neutron scattering techniques and adsorption measurement, we have been able to identify novel mechanisms that contribute to a substantial increase of the hydrogen storage capacity of the corresponding substrates, in particular in carbon-based materials.

ADVANCED INSTRUMENTATION DEVELOPMENT FOR NEUTRON SOURCES

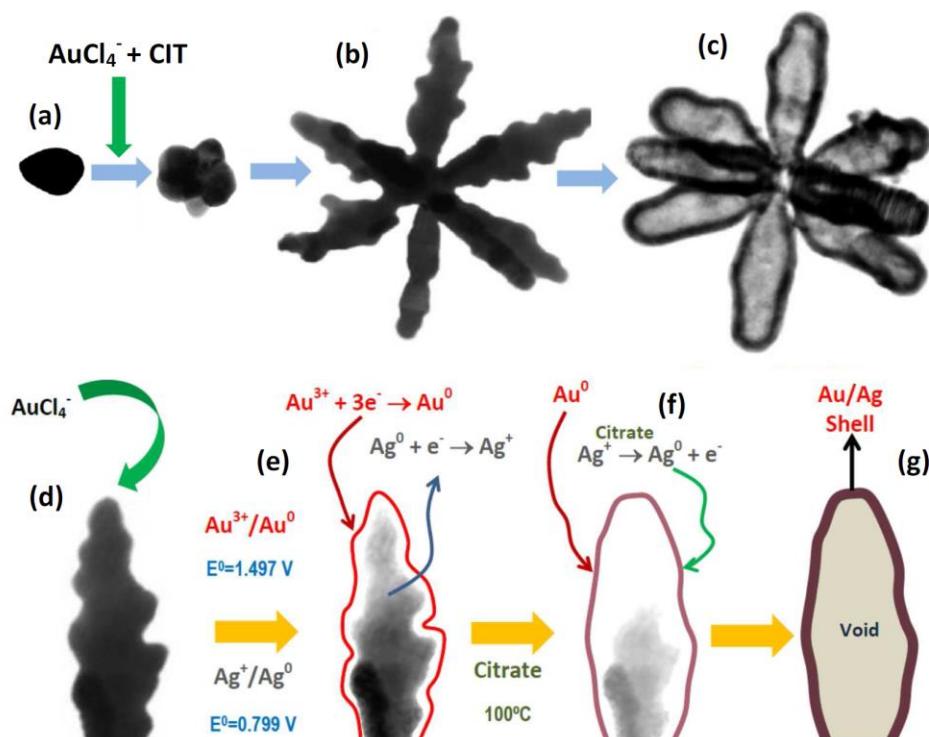
In recent years much of the work in this area developed by the group has been focused on the Spanish candidature to the European Spallation Neutron Source (ESS-Bilbao). Within this respect, on May 2009 an inflexion point was reached after an informal agreement in Bruxels in favor of the Swedish site proposal (Lund) and the subsequent agreement between the Spanish Science and Innovation Ministry and the relevant Swedish. As a consequence the ESS-Bilbao Consortium (Central Administration / Basque Country Government) has refocused its activities. More specifically, the ongoing activities are aimed at building a local infrastructure based on a high power light ion accelerator in order to provide service to advanced experimental programs not only in the production of neutron beams by nuclear fragmentation processes (spallation) but in areas as diverse as particle physics, the study of materials for nuclear fusion, unstable isotopes production for nuclear physics studies or possible applications of this kind accelerators in radiation oncology. Three are the main objectives the center:

- To serve as a center for design, development and prototyping of some acceleration structures responsible for the neutron beam energy gain up to about 2.5 GeV.
- To nucleate in our system of Science-Technology-Innovation, a laboratory specializing in science and technology of high power accelerators, comparable with those in the surrounding countries involved in the development and coordination of international large facilities.
- To provide to our industrial sectors tools to position themselves advantageously in areas requiring the use of light ion beams (high power semiconductors, aerospatial industry, lithography, ultra-hard materials).

PLASMON PARTICLE NANOFABRICATION

The nanofabrication work has continued with the manufacture of nanoparticles (NPs) with metallic plasmonic properties, displaying advanced spectroscopic and catalytical applications. The main purpose of this task was the fabrication of nanoscopic systems with specific morphological properties leading to high electromagnetic field intensifications. The strategy for obtaining these systems has been two-fold: a) The preparation of anisotropic NPs with special morphologies leading to high field enhancement, as nanostars, and b) the association of spherical nanoparticles by using bifunctional molecules leading to interparticle cavities highly effective in enhancing Raman scattering (hot spots). Progress has been also made to develop protocols for the preparation of silver nanostars with tailored morphology, which were not prepared so far in silver. These nanoparticles have a larger number of advantages in relation to gold, since Ag is more efficient in SERS, because of the greater enhancement factor, and because of their wider range of activity, as the AgNPs exhibit plasmon resonances in the visible spectrum and the near-infrared. The protocols of preparation of Ag nanostars were aimed at avoiding the use of surfactants, which are normally used in the preparation of Au nanostars, since these substances prevent the approach of the analyte to the surface, thus decreasing the efficiency of these systems in spectroscopy.

On the other hand, hollow Au/Ag nanostar-like NPs were prepared. These new NPs are expected to have interesting properties in the resonance plasmon tuning, allowing shifting this resonance towards the red-near infrared region. This should have interesting applications in the use of these NPs in hyperthermia and drug delivery. The characterization of these NPs was made by means of TEM, SEM, dark-field microscopy, as well as SERS and SEF. Finally, these results were published in the journal *Nanoscale*.



Up: (a-c) Schematic procedure suggested for the fabrication of Au/Ag hollow nanostars from Ag NS templates; Bottom: (d-g) Reaction mechanisms suggested to explaining the conversion of one AgNS arm into a hollow structure, by galvanic replacement and Ag redeposition induced by residual citrate.

SURFACE FUNCTIONALIZATION: FABRICATION OF NANOSENSORS

The functionalization of metal surfaces obtained by self-assembly of organic molecules was a fundamental work line in our group during 2015. The functionalization can highly increase the sensitivity and selectivity of the fabricated nanostructures, resulting in high performance surfaces by combining the physical properties of the obtained metal with the chemical properties of organic molecules self-assembled on them. Moreover, these molecules may increase the biocompatibility of plasmonic metal NPs, which is an issue of great interest in medical applications, and may allow the control of the self-assembly of these systems.

Functionalization experiments derivatives of the cavitands cyclodextrins and cucurbituril were employed to improve the detection ability of these systems. These linkers possess an internal cavity within which molecules difficult to be detected by SERS can be hosted.

The functionalization experiments of NPs aliphatic and aromatic dithiols of different length was completed. These bifunctional molecules perform a double function: a) the nanoparticle coupling with formation of interparticle junctions where a large intensification of the field occurs, and b) the creation of intermolecular cavities that allow the assembly of analytes. The detection of analytes is then possible because then they are concentrated in the interparticle cavities where a large intensification of the field is achieved. The NPs linking induced by dithiols was also investigated by plasmon resonance and TEM. Functionalized NPs were successfully applied to the detection of organochlorine pesticides such as endosulfan, aldrin, dieldrin and lindane. In order to do this, an optimization of the linker adsorption was previously made at different experimental conditions (surface coverage, excitation wavelength, metallic substrate), and the sensitivity and selectivity of this detection was tested by analysis of the adsorption isotherms. Moreover, a similar study was carried out for aromatic dithiols using dithiols with different lengths (bearing one or two benzenic rings between both SH groups). The preliminary results seen with these compounds demonstrate that a polymerization of molecules occurs on the surface by the formation of disulfide bonds. These studies were performed in the frame of the cooperation that our group maintains with researchers of the PJ Safarik University in Kosice (Slovakia).

POLLUTANT DETECTION

During the last year, we have carried out the application of the SERS technique in the detection of pollutants that do not need any surface functionalization. This work was accomplished in collaboration with researchers of the Universidade Estadual Paulista (UNESP) in Presidente Prudente (Brazil) and from the Universidad de Málaga (with the latter group we maintain a collaboration through an Associated Unit). We have focused our attention on the pesticide carbendazim.

This molecule is very important under the environmental point of view, since it is employed in agricultural practices in many countries of the world. Therefore, the detection of this compound is an important issue to prevent human health risks. This investigation consisted in the adsorption study on the surface through Raman, IR and plasmon resonance, assisted with the vibrational normal modes analysis with DFT of the corresponding metallic complexes.

A similar study was accomplished during the 2015 to triazine pesticides, in particular atrazine and prometryn. These compounds are frequently used in all countries, but mainly in Brazil. This is why this research line was carried out as well in collaboration with researchers from the Universidade Estadual Paulista (UNESP) in Presidente Prudente (Brazil). The preliminary results demonstrated that these compounds undergo an abiotic degradation consisting in the hydroxylation and dealkylation of periferic groups. This fact leads to important changes in the environmental behavior of these molecules that must be taken into account in order to evaluate their effects on the environment and the human health.

BIMOLECULE/NANOPARTICLE INTERACTION

The interaction of biological molecules with metal nanoparticles of Ag and Au was studied in depth during the last year. This study was also directed in part to carry out the functionalization of NPs with biomolecules to confer greater biocompatibility and selectivity to the analytical applications of these systems. In order to fulfill this goal, it was conducted a study of interaction of therapeutic peptides such as somatostatin, octreotide, lanreotide and pasireotide with Ag and Au nanoparticles. This work was done to monitor the structural changes occurring in these peptides once adsorbed onto the surface.

During the last year, we completed the research line dealing with the structural analysis of biological materials difficult to characterize by conventional spectroscopic techniques due to their large luminescence. In this sense, we have carried out a structural and dynamical investigation upon polyphenolic substances extracted from the humic substances and from melanins produced by the digestion processes of fungi. Specifically, we have conducted a SERS / SEF study of humic substances of different origin (soil, leonardite and lignite) on NPs of different morphology, and prepared by means of different protocols developing strategies to increase the intensification of the fluorescence and Raman on metal surfaces. In this regard, it was carried out the functionalization of the surfaces with aliphatic diamines to increase the signal from the above polyphenolic molecules. This study was extended to commercial humic substances named "standard", which are the ones usually employed in all laboratories. The above functionalization process leads to a substantial increase of the SERS signal, due to the fact that these important natural compounds are negatively charged. These studies were performed in collaboration with researchers from the Universities of Bologna (Italy).

SURFACE-ENHANCED FLUORESCENCE OF DRUGS ON METAL SURFACES (SEF)

We have progressed during the 2015 on the study of the formation of complexes of various drugs with cucurbituriles. Furthermore, we have started the study of new microscopic complex carrier systems of drugs, based on the inclusion of silver nanoparticles with the drug in the nanopores of a biodegradable and biocompatible synthetic polymer, i. e. PBS. This study was conducted on different size porous structures. The techniques used for characterization in both cases are surface-Enhanced Raman and fluorescence spectroscopy (SERS and SEF). The drugs used in the study were the anti - inflammatory ketorolac, indomethacin and piroxicam and emodin antitumor drugs, which were previously characterized in our group.

In the case of cucurbituriles it was obtained, in cases where it has been possible, the stoichiometry of the complex formation the pH of the binding constant and the molecular species of drug included. Finally, for the inclusion systems of the medicament in the nanoporous polymer, it was carried out an optimization of the preparation conditions giving nanopores with the best infiltration and drug immobilization properties.

LASER TECHNIQUES APPLIED TO THE STUDY AND CONSERVATION AND RESTORATION OF ARTWORKS AND MONUMENTS

In 2014 the vibrational analysis of several alkaloids (harmalol, harmaline, harmine y harmane), components of Syrian rue, was carried out. The vibrational normal modes assignment of the calculated Raman spectra to the experimental SERS spectra was performed. Calculations were carried out by mean of the Gaussian software. This work was done in collaboration with Prof. Lombardi, from the City College of New York, with the aim of aid in the study of the adsorption of the alkaloid molecules on Ag colloids.

The fabrication of silver nanoparticles by laser irradiation at 442 nm on wool fibers was continued. This work was carried out in collaboration with the University of Bologna, during the stays of a master student in our department. The employ of this type of metallic substrates is very important for the analysis of artistic pigments and dyes. This is due to the ability to be prepared directly on a specific spot of the material (fibres, in this case) without leaving any mark on it. Irradiation at 442 nm gives rise to more versatile nanoparticles than irradiating at 532 nm. In the first case, SERS spectra can be obtained at various wavelengths (442, 532 and 785 nm). In the second case, SERS analysis can only be

carried out at 532 nm. The optimization of the experimental conditions, such as laser power, irradiation time and silver nitrate concentration was carried out. The prepared nanoparticles were used for the analysis of synthetic dyes on mock and real samples of dyed wool samples. Dyes of different groups, such as triarylmethanes, xanthenes and monoazo were studied. On the other hand, during the stay of another Master student of the same University, the identification of anthraquinonic colorants, such as alizarin, purpurin and carminic acid were carried out in reference samples of paints and real cross sections. For this work, different strategies were employed, such as the use of concentrated and non-concentrated colloids and nanoparticles prepared by laser irradiation. These samples, unlike the study of dyes in fibers, the employed of small volumes of slightly concentrated colloids was more efficient.

In collaboration with the Laser, Nanostructures and Materials Processing of the Instituto de Química-Física Rocasolano the UV laser cleaning of sulfureted silver samples, pure silver as well as sterling silver was studied. In particular, optic microscopy and Raman spectroscopy were employed to analyze physical and chemical modifications of the samples after laser irradiation at several wavelengths (213 and 266 nm)

removal of various varnishes on painting substrates was studied. In particular, optical and Raman microscopies were employed to study physical and chemical modifications of the samples after irradiation at various wavelengths (213 and 266 nm). The employed varnishes were terpenoid resins such as turpentine, copal, dammar, colofonia, sandarac and mastic. Those varnishes were studied both in solvent and in oil. Thus, the analysis were carried out in natural and aged samples by naturally and artificial aging. Raman spectroscopy was used to study the photo-oxidative degradation of varnishes originated by high energy laser irradiation and the related increase of temperature.

The work consisting in the application of Raman spectroscopy and SERS technique to the study of pigments employed in ancient Islamic manuscripts from Morocco was highly advanced. The use of Ag nanoparticles applied on certain areas of coloured inks of the manuscripts and the employ of confocal Raman, allowing an increase of the spatial resolution of the measurements, have revealed the presence of anthraquinone pigments in these manuscripts. We are currently investigating the possible presence of organic pigments by SERS in ink marks of yellow, green and black colours. This work was carried out thanks to the collaboration with researchers from the University Moulay Ismail in Meknes (Morocco).

We have carried out a research work in collaboration with the Instituto de Ciencia y Tecnología de Alimentos y Nutrición (ICTAN, CSIC) dealing with the study of the structure of lipids and proteins and their possible interactions in processes related with the formation of emulsions of olive oil in water. In particular, emulsions stabilized with soy proteins and others stabilized with this protein plus sodium caseinate and transglutaminase were employed.

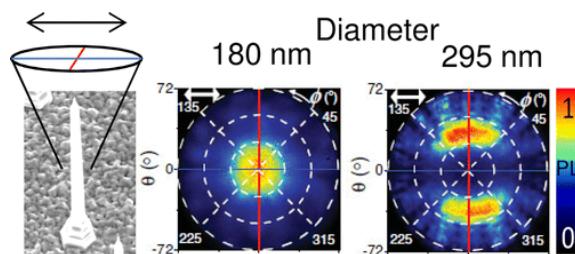
A work of synthesis of C-S-H gels which is now in progress was started in 2015. These gels are the main component of the artificial construction materials. This work was conducted in order to evaluate the possible structural modifications induced by the variation of the initial Ca/Si ratio. Due to the amorphous nature of the compound, the structural evolutions of the material were studied by means of the Raman and ^{29}Si RMN spectroscopy, while the microstructure of the gels was studied by TEM.

In collaboration with the IETCC, during the 2015 year we have worked on the development of consolidant treatments related to the use of alcoholic emulsions of $\text{Ca}(\text{OH})_2$ nanoparticles as active principle. The goal of this research line is to increase the solubility of the calcium in order to decrease the amount of added product.

Finally, in collaboration with the Servicio de Criminalística del Instituto Nacional de Toxicología y Ciencias Forenses de Madrid, a research line was started during the 2015 dealing with the study of a methodology of analysis of bones based on the application of the Raman technique.

SEMICONDUCTOR NANOWIRE PHOTOLUMINESCENCE & PHOTODETECTION

Lighting applications require directional and polarization control of the emitted light, which is currently achieved by bulky optical components such as lenses, parabolic mirrors, and polarizers. Ideally, this control would be achieved without any external optics, but at the nanoscale, during the generation of light. Semiconductor nanowires (NWs) are promising candidates for lighting devices due to their efficient light outcoupling and synthesis flexibility. In our work, we have demonstrated a precise control of both the directionality and the polarization of the nanowire array emission by changing the NW diameter, as evidenced by Fourier microscopy images (see figure) of the angular emission pattern, from a (p- or s-polarized) large-angle doughnut shape to an unpolarized narrow-angle beaming along



the nanowire axis. This has been done in collaboration with the group of Prof. Jaime Gómez Rivas FOM-Institute AMOLF (Amsterdam) and Philips Research Labs (Eindhoven).

On the other hand, light absorption from finite semiconductor NWs has been investigated through a unified theoretical picture and numerical simulations. We first showed theoretically from the electromagnetic mode dispersion relation and the Mie extinction cross sections for infinite NWs that formally equivalent (Janus) formulas yield both leaky/guided modes and Mie resonances. For finite semiconductor NWs, the angle of incidence becomes critical: absorption is dominated by Mie resonances at incident angles perpendicular (and oblique) to the NW axis; by contrast, guided mode excitation (if spectrally available) governs and enhances absorption at grazing incidence. Such theoretical prediction can be exploited to optimize NW designs for broad band and broad angle light harvesting applications.

METAMATERIALS BASED ON HRI DIELECTRIC STRUCTURES

We have carried out a full description of the photonic band structure of doubly resonant core–shell metallo-dielectric NW arrays, in order to demonstrate their behavior as low-loss, isotropic bulk optical NIMs. We have shown that such NW arrays exhibit indeed robust flat lensing with subwavelength resolution and dipole position independence. Our results and procedure serve to fully assess such fascinating properties as optical NIMs of the doubly resonant core–shell metallo-dielectric NW arrays, paving the way towards realistic fabrication thanks to the tolerance to specific geometric considerations and inhomogeneities. In addition, we have theoretically and numerically demonstrated the existence of the so-called localized magnetic plasmon resonances in $\mu < 0$ effective media made of all-dielectric (HRI) meta-atoms. A universal condition for the occurrence of such magnetic plasmonic phenomena is in turn developed, revealing that available materials and sound size parameters enable it for a wide spectral regime throughout the microwave, THz, far and near IR regimes. Our theoretical work thus paves the way towards a realistic $\mu < 0$ plasmonics with the wealth of applications of “electric” plasmonics expected reciprocally in its “magnetic” counterpart.

PLASMON SPECTROSCOPY: THEORETICAL AND NUMERICAL CALCULATIONS, AND OPTIMIZATION TECHNIQUES

We have presented an overview of recent advances in plasmonics, concerning theoretical and numerical tools required for the determination of the spectral properties of complex-shape nanoparticles exhibiting strong localized surface plasmon resonances (LSPRs). Both quasistatic approaches and full electrodynamic methods have been described, providing a thorough comparison of their numerical implementations. In addition, the design of complex geometries to retrieve LSPR spectra was commented on, with special interest in bio-inspired algorithms. The wealth of LSPR-based applications was discussed in two examples, single-nanoparticle surface-enhanced Raman scattering (SERS) and optical heating, and multifrequency nanoantennas for fluorescence and nonlinear optics.

SPECTROSCOPY IN INFRARED LASER INDUCED ABLATION PLASMAS

The plasma generated by LIBS technique on muscle tissue swine samples has been investigated using a high-power pulsed laser of CO₂. The emission of the plasma shows excited neutral Na, K, C, Mg, H, N and O atoms, ionized C⁺, C²⁺, Mg⁺, N⁺ and O⁺ species and molecular band systems of CN(B²Σ⁺ – X²Σ⁺), C₂(d³Π_g – a³Π_u), CH(B²Σ⁻ – X²Π ; A²Δ – X²Π), NH(A³Π – X³Σ⁻), OH(A²Σ⁺ – X²Σ⁺), and CaOH(B²Σ⁺ – X²Σ⁺; A²Π – X²Σ⁺). We focus our attention on the dynamics of the swine muscle tissue laser induced plasma species expanding into a vacuum of 0.8 and 0.01 Pa. Time-resolved two-dimensional emission spectroscopy is used to study the expanded distribution of different species ejected during ablation. Spatial and temporal dynamics of different atoms and ionic excited species are reported. Plasma parameters such as electron density and temperature were measured from the spatio-temporal analysis of different species. For some silicon and magnesium species their average velocities in the plasma were estimated

The spatio-temporal evolution of the silicon monoxide SiO plasma produced by a high-power CO₂ pulsed laser has been investigated using optical emission spectroscopy (OES) and imaging methods. The formed plasma was found to be strongly ionized, yielding Si⁺, O⁺, Si²⁺, O²⁺ and Si³⁺ species, rich in neutral silicon and oxygen atoms, and very weak molecular bands of SiO. Time integrated and time-resolved two-dimensional OES plasma profiles were recorded as a function of emitted wavelength and distance from the target. The temporal behavior of specific emission lines of Si, Si⁺, O⁺, Si²⁺, and O²⁺ was characterized. The results show a faster decay of O⁺ and Si²⁺ than that of O⁺, Si⁺ and Si. The Stark broadening of isolated single-ionized silicon emission lines was employed for deducing the electron density during the plasma expansion. The relative intensities of two Si²⁺ lines and the Boltzman equation were used to calculate the time evolution of the plasma temperature, ranging between 1 and 3 eV.

INFRARED AND RAMAN BIOSPECTROSCOPY

Within the Project InnImpacto IPT-2012-0769-010000, infrared and Raman spectroscopies have been applied to analyze the protein structure and composition of blood plasma. The analyzed samples correspond to 23 healthy controls, 39 patients with Alzheimer’s disease (AD) and 42 patients having frontotemporal dementia (FTD) in their initial stages,

these three groups being age-matched. Multivariate analysis applied to all of the samples studied so far provides an accurate classification about 90% to distinguish between healthy controls and AD patients, and another accurate classification of about 85% for differential diagnostics between AD and FTD patients.

Within the project Retos-Colaboración (RTC-2014-1842-1), infrared and Raman analyses have been carried out for various samples (10) of pleural and ascitic fluids belonging to healthy controls and neoplastic patients. With this aim, spectra have been measured for proteins (VEGF, MCP-1) and nucleic acids components whose contents can change in the above biological fluids from neoplastic patients. A selection of spectral regions has been performed in order to start discriminant analysis for identification of spectral markers.

2B.3 MOLECULAR PHYSICS DEPARTMENT

RESEARCH LINES:

- Molecular physics of atmospheres, astrophysical systems, and plasmas.
- Molecular Fluid Dynamics.
- Laser Spectroscopy
- Theoretical Molecular Physics

RESEARCH SUBLINES:

- Molecular physics of atmospheric and astrophysical systems.
- Kinetics of cold plasmas and studies on plasma-surface interactions.
- Dynamics and kinetics of chemical reactions.
- Raman Spectroscopy in supersonic gas jets.
- Energy transfer by inelastic molecular collisions.
- Crystallization in cryogenic micro-jets of molecular liquids.
- Spectroscopic parameters of molecules of interest in atmospheric or combustion processes.
- High resolution spectroscopy of molecular ions of astrophysical relevance.
- Molecular Quantum Control.
- Molecular Alignment and Orientation.
- Ultracold Quantum gases.
- Spectroscopic analysis of phyllosilicates.

EMPLOYED TECHNIQUES:

- IR spectroscopy and mass spectrometry applied to low temperature, low pressure systems.
- Computacional methods: Gaussian, SIESTA, CASTEP.
- Cold plasma generation in low pressure gas discharges.
- Mass spectrometry of ions and neutrals with energy resolution.
- Visible emission spectroscopy of plasmas.
- Langmuir probes for electron energy and charge density measurements.
- Linear and Stimulated Raman Spectroscopy.
- Supersonic gas jets.
- Undercooled liquid micro-jets.
- Cryogenics
- Raman-Raman double resonance spectroscopy.
- Difference frequency laser spectroscopy

RESEARCH ACTIVITY:

MOLECULAR PHYSICS OF ATMOSPHERES AND PLASMAS

This line of research is divided in the five sub-lines indicated in more detail below.

Molecular physics of atmospheric and astrophysical systems

Around 2006 we initiated the study of solid systems, analogues of astrophysical objects. Since then, we have prepared ice mixtures of water and several molecular systems (CO_2 , CH_4 , CH_3OH , NH_4^+ , COOH), which are some of the main constituents of comet nuclei and interstellar media particles, and studied them using infrared spectroscopy and mass spectrometry. By means of a closed-cycle He cryostat we can extend our experimental range down to 6 K covering a temperature interval very interesting in astrophysics. In the following paragraphs we describe in more detail the main contributions achieved during the last year.

Astrobiology has become a trendy field of research for the latest years, especially owing to the possible detection of biologically relevant molecules in astrophysical systems (dust, comet nuclei, asteroids...). In our group, we continue with this line, and in 2015 we have completed a study on the stability of the aminoacid glycine under conditions that simulate those within dense molecular clouds of the interstellar medium (ISM). In particular, we have irradiated glycine ice with high energy electrons. Glycine has become the paradigm of this type of molecules for laboratory studies, partly because it is a simple molecule, but also because it has been detected in some astronomical objects, like comets or condrites. Among the conclusions of our work, we can mention here that some compounds like CO_2 , OCN^- and possibly amides, are formed by radiolysis of glycine. We conclude as well that, if glycine were formed in the early stages of creation of the solar system, its survival up to the present time is unlikely.

We have carried out another study within this same field of research, dealing with the interaction between glycine and a substrate of hydrogenated amorphous carbon (HAC), mainly from a theoretical point of view. The substrate has been designed following previous investigations that labelled this system as “hard” or “soft”, depending on the lower or higher H/C ratio of the sample. The calculations have been performed using solid state programs. They reveal that glycine attaches to the substrate via the acidic COO^- group, and that when several glycine molecules are present they tend to bind themselves by H-bonds. The theoretical results are compared to observations in our laboratory.

A further line of work has been opened to collaborate with the Institute of Low Temperature Science (ILTS) of the University of Hokkaido at Sapporo, in particular with the group of Profs. Naoki Watanabe and Akira Kouchi. They have first class experimental equipment which has been used to study $\text{CO}/\text{H}_2\text{O}$ ice mixtures at various conditions. Our part of the collaboration deals initially with the prediction of the IR spectra of these mixtures, and the comparison with the observations. This work is under progress.

We keep our collaboration with Dr. Guillermo Muñoz Caro and his group at Centro de Astrobiología (CAB), CSIC-INTA. Besides the ongoing research on the prediction of spectra in the far-IR region of amorphous ices and ice mixtures, we have now carried out measurements of CO_2 ice photoprocessing, with interesting results already published. The mixtures studied recently consist on water/methanol, and water/ammonia, of various proportions. These results, together with experimental recordings, have been submitted for publication recently.

Similarly, we continue with a new line of research which promises to open up for us a wide field range of possibilities. We combine therein several of our experimental techniques. In the first place, we generate carbonaceous deposits, the so-called hydrogenated amorphous carbon (HAC), by using the plasma enhanced chemical vapor deposition (PECVD) technique. Such samples are admittedly good models for interstellar dust particles, and are therefore interesting in their own merit. But in addition, they can be used as substrates for deposition of other species, and the whole sample can then be irradiated with different sources (UV or X-ray radiation, electrons, protons...), simulating the conditions present in some interstellar clouds.

From the experimental point of view we have undertaken the design of a new vacuum chamber that will reach the 10-11 mbar range that is known as ultra high vacuum. This chamber will open a new field of possibilities, allowing us to perform experiments that require very high purity or large time scales.

Regarding atmospheric studies, we have continued the collaboration with Dra María Teresa Baeza Romero, from Universidad de Castilla La Mancha. We obtained funding from the Ministerio de Economía y Competitividad to study the formation and reactivity of aerosols containing iodinated compounds by experimental and theoretical techniques. We have finished the first studies both theoretically and experimentally. In addition, and in collaboration with Dr. Alfonso Sáiz López, from IQFRF, CSIC, we have carried out a study on the photolysis of an atmospherically relevant frozen iodate salt. This process is specially interest due to it can potentially provide a pathway for the release of active iodine to the polar atmosphere and increase the concentration of IO in the Antarctic. We have determined the absorption cross section of frozen iodate and this value has been implemented in an atmospheric model of the Antarctic boundary layer, which predicts that IO concentration could be increased in 1-1.5 pptV. These levels of IO are lower than the highest measured in coastal regions, but are similar to that observed in the continent. This study has been published in the ACPD journal for discussion and it is an evaluating process for final publication in ACP. In addition, this work has been presented, as an invited talk, in the “8th INTERNATIONAL Conference on Advanced Vibrational Spectroscopy”.

Furthermore, we have carried out a collaboration with Dr. Hinrich Grothe from TU Wien with the aim to analyze the interaction of the alpha phase of the nitric acid trihydrate (α -NAT) with water. Researchers from different countries (Austria, Germany, United Kingdom and Switzerland) have participated in this work. The atomic structure of the alpha phase has been solved for the first time, revealing a higher affinity for water than the most stable beta-phase. This work has been sent for publication to the high impact factor journal *Angewandte Chemie International Edition*.

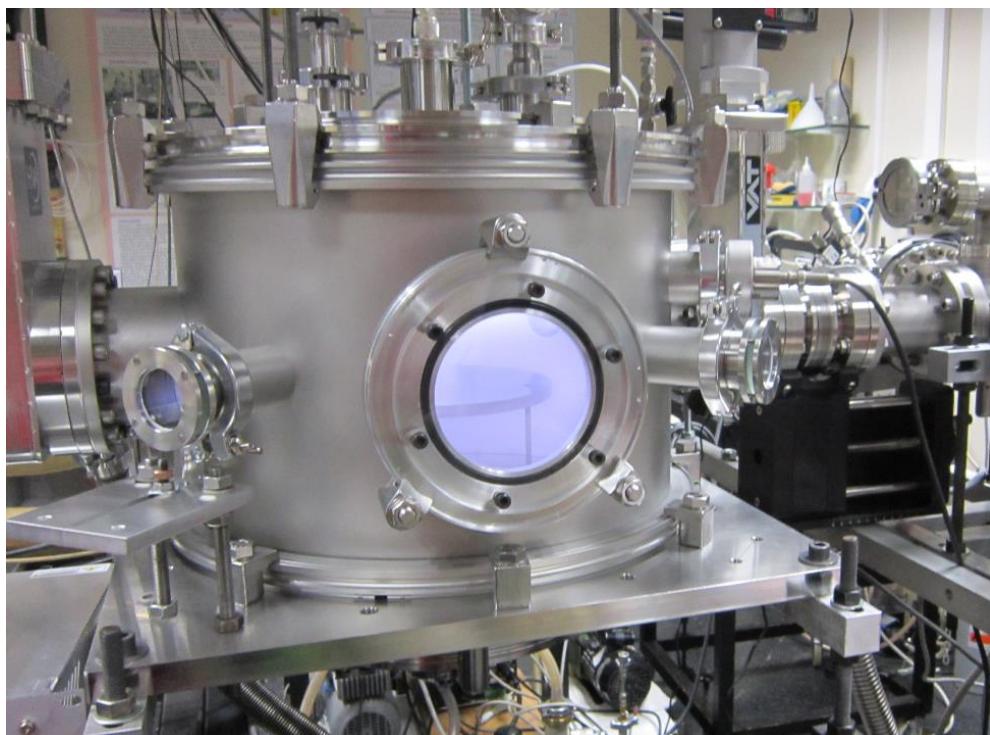
Furthermore, we have started to study in the mid and far infrared regions and the ultraviolet and visible too, spectra of the atmospheric aerosol described as mineral powder, which is basically composed of phyllosilicates such as smectites and montmorillonites, together with particles ranging from 2 to 50 μm of quartz, feldespat, calcite, iron and aluminum oxides, silicon, gypsum and aragonite. In collaboration with Dra. Ana María Fernández (CIEMAT) a series of experiments and theoretical modeling has been done in order to study the palygorskite mineral from Serradilla (Cáceres).

Within the frame of a Unidad Asociada with the Department of Physical Chemistry of the Complutense University, we have been collaborating with Dr. Pedro C. Gómez Calzada on the theoretical calculation of different molecular systems for several years. In recent times, we are starting a new field, consisting in the prediction of spectra in the near-IR region of amorphous ices by means of Molecular Dynamics. In particular, our aim is to estimate the spectra of solids made of H_2O and various small molecules, like CO_2 , CH_4 and others, such as are found to exist in the so-called Trans Neptunian Objects, including Pluto and Charon, for which new data are becoming available from the New Horizons mission.

Kinetics of cold plasmas and plasma wall interactions

We have continued our research work on the kinetics of cold plasmas. In this way, we have finished an experimental and theoretical study about $\text{H}_2 + \text{O}_2$ plasmas at 8 Pa with different concentration ratios which has allowed to unveil the wall processes responsible of the formation of H_2O as stable product and the generation of the major ions H_3^+ y H_3O^+ y O_2^+ , depending on the mixture ratio of the precursors. As an innovation to former models developed by us, it is worth mentioning the incorporation of negative ions to our models. Their main contribution is the decrease of concentration of electrons in the plasma.

We have studied the formation of amorphous hydrogenated carbon films of astrophysical interest, which we have generated by radiofrequency discharges of He and CH_4 mixtures. Afterwards, we have characterized these films by Fourier transform infrared spectroscopy and have processed them with electron beams at 5 keV, with the aim to investigate structural and composition changes in these films.



Laboratorio de Plasmas Fríos. Plasma a baja presión en una descarga de radiofrecuencia capacitiva para formar análogos de polvo interestelar.

With funding of a UE Synergy Project “Nanocosmos”, we have designed and built an experimental system to generate carbón analogs of interstellar dust in a capacitively couples radiofrequency discharge and study the main processes. This equipment is actually being characterized and optimized (see figure).

The main results of this research can be seen in the papers and presentations to conferences shown in this Memory.

Dynamics and kinetics of chemical reactions

We have continued our studies on the MuHH system and its deuterated variants in collaboration with the group of Prof. F. J. Aoiz from te Universidad Complutense (Madrid). Specifically we have started the quantum mechanical study of the D+MuH ($v=1$) reaction and have observed the appearance of a deep attractive well in he adiabatic potential corresponding to the adiabatic potential corresponding to the DMu+H exit channel, which suggests the formation of a “vibrational bonding”, dynamic in nature and not associated with a minimum in the electronic potential. At present we are investigatin the characteristics of the attractive well and its implications for the reactivity.

We have also studied the influence of rotational excitation of the reactants on the H+D₂ ($v=0, j=0$) system using quantum mechanical and quasiclassical calculations. The results of the two approaches are in very good agreement and show that rotational excitation is more efficient than translational excitation for promoting reactivity when the total energy is high. In contrast, for low energetic values, the effect of rotation is inhibited by steric restrictions of the potential and its relative efficiency for promoting reactivity is lower that that of translation. The results also show that rotational excitation in the reagents is largely released as product’s translation.

Molecular Quantum Control. Molecular alignment and orientation. Ultracold Quantum gases

We have completed the extension of the method of adiabatic evolution of Floquet Hamiltonian to the development of a very general method to control rotational excitation while simultaneously controlling the alignment of molecules for initial excited states with high J quantum number and arbitrary M.

We have pursued the study of orientation control of interacting dipolar molecules in an optical lattice. We have proved the feasibility of a very precise control of molecular entanglement via controlled crossings of quasienergies of relevant lattice states. The crossings are induced by a combination of orientation control at each node, control of the spatial lattice symmetry and adiabatic change of the laser polarization direction.

We have developed a simplified model to optimize quantum transport in the presence of interaction in a quantum gas. Controlling the interaction parameter we can start o stop the transport process in a very precise way.

MOLECULAR FLUID DYNAMICS

The Group of Molecular Fluid Dynamics is specialized in the quantitative study of fluid flows out of equilibrium. We have continued along 2015 studying these flows at the interface between the microscopic description, essentially molecular and quantum, and the macroscopic one, governed by the continuum fluid mechanics. Although both limits are well developed as independent fields, their link is a sort of no-man's land lacking experimental data, sufficiently rigorous theoretical models, and efficient calculation methods. Supersonic gas jets are a very fruitful research media, where the study of inelastic collisions, the fundamental mechanism of energy transfer between gas molecules, can be afforded. Undercooled liquid jets are an ideal medium for studying experimentally the homogeneous solidification, free from container wall effects or impurities.

We have finished the work on inelastic H₂O(gas):He collisions, in collaboration with the group of Theory and Simulation of Molecular Interactions, of the Instituto de Física Fundamental CSIC. Starting from our mesaurements and the calculations by the theoreticians group, a set of state-to-state rate coefficients for H₂O:He have been obtained, able to replicate the experiments within 15% between 20 and 120 K. This work was continued by a study of the broadening coefficients for 21 rotational lines of H₂O by collisions with He atoms. Both elastic and inelastic collisions contribute to the line broadening. By using our inelastic rate coefficients from the former work, the elastic contribution is shown to increase markedly at low temperatures, while differing much from line to line, thus rendering of little use their modeling by simple empirical laws.

We have carried out new measurements of mixtures of H₂O(g) with *para*-H₂ and *normal*-H₂ to study the H₂O:H₂ collisions, of great astrophysical interest. The main issue here is to determine with enough accuracy the translational temperatures, due to the anomalous fluid dynamic properties (bulk viscosity) of H₂. Last year measurements on jets with high Reynolds numbers showed quite small gap between rotational and translational temperatures, what translates into significant errors at inverting the kinetic Master Equation on the rotational populations. In order to search for the optimum conditions, we measured jets of *para*-H₂ and H₂O mixtures with different conditions, at fixed points, shedding

light as well on the effect of the H₂O onto *para*-H₂ relaxation. Then, we carried out new measurements of *para*-H₂ and *normal*-D₂ jets at optimum pressure (~250 mbar), whose analysis will be used as a reference for their mixtures with H₂O.

Significant progress has been achieved on a molecular formalism of the fluid dynamic theory of supersonic jets, allowing a better exploitation of the experimental data on number densities and rotational populations. Furthermore, this theory allows a clear interpretation of two fundamental quantities not well understood to date, the translational temperature and the entropy along the jet, which cannot be determined directly from experiments. Both quantities can be expressed now in terms of relatively simple equations of macroscopic properties, or in terms of the inelastic collision rates from a molecular point of view. This progress came along with an improved procedure for the reduction of the raw data into the refined ones, allowing a much more accurate determination of the derivative functions associated to the macroscopic and microscopic description of the jet. The practical application of all the above to several H₂ jets, spanning a wide range of temperature (250 to 5 K), shows substantial progress. The understanding and accurate quantification of those jets is a must for the successful interpretation of the H₂O:H₂, collisions, capital in molecular Astrophysics.

On the instrumental section, we have tried a new method to build slit nozzles: by gluing two razor blades, split apart by a spacer. A new 30 μm x 2 mm nozzle was successfully produced that way, then tested with a N₂ jet, and its flow field measured. Slit nozzles produce gas expansion in just one direction, with a milder change in the gas dynamic quantities, allowing measuring the rotational relaxation at higher temperatures than from circular nozzles.

We have finished a work on the small clusters of *ortho*-D₂, in the spectral region of its fundamental vibration (~2990 cm⁻¹). These clusters were produced in supersonic jets from cryogenic nozzles, and were detected in the Raman spectrum by their lines at lower frequency than that of the free molecule. The vibrational shifts measured in our laboratory have been calculated by the group of P.N. Roy at the University of Waterloo (Canada). On the other hand, we have observed new transitions of the dimer (oD₂)₂ in the rotational region (~180 cm⁻¹). The coupling of the end-over-end rotation of the dimer with that of the constituent monomers gives rise to a very complex structure, whose analysis is currently under way.

We have recorded torsional Raman spectra of dimethyl-ether (DME), its doubly ¹³C substituted isotopologue, and of cooled DME in supersonic jet. For this latter purpose, a special cell to expand aggressive gases (flammable, solvents, etc.) had to be employed. The spectral region of the torsional overtones of DME is rather complex due to their coupling with the C-O-C bending mode, and the presence of many hot bands, but it is of astrophysical interest in order to detect these molecules in the interstellar medium. The spectrum of cooled DME allowed us to assign unequivocally the torsional overtones and their first hot bands, amending a wrong assignment from the literature. This work is a collaboration with the department of Theoretical Chemistry and Physics of the IEM (M. L. Senent) and with the University of Huelva (M. Carvajal).

Finally, we have continued collaborating with the University of Frankfurt (Germany) on the crystallization of liquid microjets (filaments). We have finished the study of *para*-H₂ and *ortho*-D₂ filaments doped with Ne, showing that the presence of small amounts of Ne impurities slows down markedly the crystal kinetics and affects its structure. The first experiments on x-ray scattering from Ar and Kr filaments were successfully carried out at the DESY synchrotron in Hamburg (Germany). Diffraction images from the liquid and from the crystal were recorded, with high time resolution (~ns), what allows to track the crystallization of the filament like in the Raman scattering experiments at our laboratory.

LASER SPECTROSCOPY

Spectroscopic parameters of molecules of relevance in atmospheric and combustion processes

In the first months of 2015 we carried out, using stimulated Raman spectroscopy, a study of the ¹³C isotopologue of carbon tetrafluoride, CF₄. Unlike the main isotopologue ¹²CF₄, ¹³CF₄ has received little attention so that most of its IR-forbidden, Raman-active vibrational bands had never been observed by high-resolution spectroscopic means. In the course of our study we recorded spectra of the Q branches of the v₁ fundamental band, the 2v₂ overtone, the v₁+v₄-v₄ hot band and the 3v₂-v₂ hot band overtone. v₁ and 2v₂ were studied at both room temperature and 140 K, while the two hot band spectra were recorded only at room temperature.

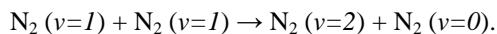
The analysis of the spectra, still ongoing, is being carried out by Prof. V. Boudon of the University of Burgundy, using symmetry-adapted models specifically tailored to the study of spherical tops. Once finished, it will yield refined molecular constants for this isotopologue.

Continuing our collaboration with Dr. Ha Tran and Tuong Le Cong (Laboratoire Interuniversitaire de Systèmes Atmosphériques, Citél, Francia) we have studied samples of HCl diluted in SF₆ by high resolution IR spectroscopy, in

order to validate molecular dynamics simulations that predict collisional broadenings in a wide pressure interval, when the collider is a heavy molecule. With the same group, we have also studied line profiles of isolated CH₄ lines in mixtures with He. In collaboration with Dr. Daniel Lisak (Institute of Physics, Nicolaus Copernicus University in Torun) and other laboratories we have exhaustively characterized the profile of H₂O absorption lines diluted in N₂ in order to further validate the spectroscopic profile proposed by the IUPAC as new standard for spectroscopic databases (the Hartmann-Tran profile) as a substitute for the now deprecated Voigt profile.

Raman spectroscopy of excited states populated by optical pumping and molecular collisions

In the course of the collisional relaxation studies carried out in 2014 on the molecule of ¹⁴N₂, which were based on the use of a pump-probe Raman-Raman experimental setup, it was observed that the $v=2$ excited vibrational state became significantly populated despite the optical pumping system depositing population only in the $v=1$, lower-lying vibrational state. Thus, population transfer from $v=1$ to $v=2$ must occur by means of collisions of the type described by



The presence of a significant population in $v=2$ allowed us the experimental observation of the second hot band ($v=3 \leftarrow v=2$) in ¹⁴N₂. In view of this result, it was decided to adopt this type of sequential experimental scheme (optical pumping + collisional energy transfer + spectroscopy) to carry out similar studies in other molecules, thus taking advantage of the fact that the process of optical pumping followed by collisional energy transfer allows the population of excited vibrational states which are hard to reach by other means. This type of experiment requires a careful optimization of variables like sample pressure and pump-spectroscopy delay in order to maximize the population transfer to the excited states one wishes to study. It is important to highlight the fact that, with our setup, the experiment can be carried out at relatively low pressures, of the order of a few milibars or tens of milibars, allowing us to obtain spectra in what can be described as high-resolution conditions, and thus resolve the dense Q-branch structures in the observed vibrational bands.

In molecules with several vibrational modes the possibility arises for collisions to populate vibrational states (v_j) belonging to different modes from the one initially populated by optical pumping (v_i), since besides the type of collision described by



which is analogous to the one already mentioned above for ¹⁴N₂, one has to take into account the new types



which can also happen in the initial instants after optical pumping. Thus, the different types of collisions can potentially provide access to a broad range of excited vibrational states which are then susceptible of being studied by the spectroscopic stage of the experiment.

As a first systematic application of this technique, in the second half of 2015 we initiated a study, which is still ongoing, of the different ¹³C isotopologues of acetylene (¹²C₂H₂, ¹³C₂H₂ and ¹²C¹³CH₂) at low temperature in order to search for transitions between vibrational states not previously observed. So far, high-resolution Raman spectra of five different vibrational hot bands which had not been observed before have been recorded and their departure and arrival states identified, which constitutes a sizable achievement in a family of molecules as extensively studied as acetylenes have been.

High resolution spectroscopy of molecular ions of astrophysical relevance.

We have studied the high resolution IR spectrum of the HCl⁺ ion. This molecular ion is of fundamental interest both in chemistry and astrophysics, and is a key molecule in the chlorine chemistry in space. From another point of view, it is an ideal molecule to study separately spin-orbit and spin-spin couplings in diatomic molecules. The HCl⁺ ion has recently been identified both in space and in the laboratory, in the mm-wave region. There exists a wealth of data from UV-vis emission as well. However, the lack of data in the vibratin-rotation region is noteworthy, with a couple dozen lines measured with moderate accuracy (0.001 cm⁻¹). This scarcity of IR information, together with the fact that there are currently no satellites or ground based telescopes capables of observing in that frequency region makes it desirable having precise laboratory data on those transitions that could be opbserved from ground with IR telescopes. We have optimized the production conditions in the hollow cathode-discharge and we have measured 160 new transitions of both H³⁵Cl⁺ and H³⁷Cl⁺ isotopologues with ~3 MHz accuracy, both in the ²P_{1/2} and ²P_{3/2} states. In collaboration with

Dr. Brian Drouin from JPL (NASA) these new lines have been merged in a global fit together with all previously available data to an effective Hamiltonian, which has allowed the determination of new parameters and the refinement of previous ones. We envisage the inclusion and update of the entry in the JPL database (Millimiter and sub-millimiter wave spectral line catalog.) The study has also shown hints of proton hyperfine effects not yet studied, and that could not be observed in the previous THz study. The recording of new transitions at lower pressure will likely shed light on this new effect.

From an experimental point of view, we note the implementation of a new mixing crystal in the spectrometer (a PPLN or “Periodically poled Lithium Niobate), that has allowed for an increase of x10 in the IR power available, and modifications on the hollow cathode cell aimed towards its cooling with cryogenic fluids.

2B.4 MACROMOLECULAR PHYSICS DEPARTMENT

RESEARCH LINES:

- Multiscale simulation of polymeric materials and biological macromolecules.
- Physical properties and nanostructure of polymers.
- Polymer Physics: Order and mobility in macromolecular systems.
- Application of the synchrotron light to the study of polymers and nanostructured materials.
- Biophysics.
- Interfaces.

RESEARCH SUBLINES:

- Nanoindentation in polymer-based systems.
- Polymer nanocomposites: Structure and physical properties.
- Confined structure and dynamics in Soft Matter.
- Conformation of biological Soft Matter: Membrane protein solutions.
- Microdeformation processes, relation to the nanostructure and optimization of the mechanical properties.
- Early stages of polymer crystallization under shear deformation.
- Nanostructure of multilayer materials by means of Ultra Small Angle X-ray scattering.
- Structure development and properties of natural polymers and nanocomposites.
- Recrystallization processes in semirigid systems.
- Pre-crystallization phenomena, crystallization and phase transitions in synthetic and natural polymers.
- Study of polymerization reaction by quantum mechanical calculation.
- Hierarchical simulation of molecular dynamics.
- New polyolefins with controlled architecture: structure and properties.
- Molecular dynamics and viscoelastic properties.
- Extrusion and elongational processes in polyolefins and blends.
- Molecular dynamics and dielectric properties.
- Structure-dynamics -relationships in soft and polymeric condensed matter.
- Tridimensional electron microscopy: Structural study of biological macromolecules.
- Hydrodynamics of proteins and biological macromolecular complexes.

EMPLOYED TECHNIQUES:

- Scattering and diffraction of X-rays at Wide (WAXS), Small (SAXS), and Ultra-Small (USAXS) Angles and with grazing incidence (GISAXS) including micro- and nano-beam with synchrotron radiation.
- Scanning Differential Calorimetry.
- Incoherent quasielastic neutron scattering.
- Optical microscopy. Scanning electronic microscopy.
- Raman Spectroscopy.
- Nanoindentation.
- Neutron Scattering.

- Broad band dielectric spectroscopy.
- Shear rheometry in continuous dynamic torsion, capillary extrusion and elongational rheometry.
- Dynamic mechanical analysis under flexural deformation.
- Dynamic mechanical analysis under tensile deformation: elastic modulus.
- Analysis by crystallization temperature fractionation (CRYSTAF).
- Scanning/transmision electron (STEM) and atomic force (AFM) microscopies.
- Size exclusion chromatography (SEC) and and tetradection, and dynamic light scattering (DLS).
- Nanoimprint lithography (NIL).
- X Photon Correlation Spectroscopy (XPCS).
- Scanning transmission X-ray spectro-microscopy (STXM).
- Simulations using high performance computing.

RESEARCH ACTIVITY:

Group of NANOSTRUCTURE AND MECHANICAL PROPERTIES OF POLYMER SYSTEMS

A REVIEW ON THE APPLICATION OF DEPTH-SENSING INDENTATION TO POLYMER MATERIALS

A large part of our research activity during 2015 has been devoted to elaborate a comprehensive review on the application of advanced indentation techniques to polymer nanocomposites. The work covers nanocomposites of diverse nature but special attention is paid to those incorporating carbon-based nanofillers (nanotubes, graphene, nanodiamond). The current literature on instrumented indentation provides apparently conflicting information on the synergistic effect of polymer nanocomposites on mechanical properties. The review highlights the importance of an appropriate choice of the testing conditions and the methodoly for data analysis. An effort has been done to gather information from different sources to offer a clear picture of the state-of-the-art in the field. It is shown that nanoindentation is a most valuable tool for the evaluation of the modulus, hardness and creep enhancements upon incorporation of the filler. It is found that thermoset, glassy and semicrystalline matrices can exhibit distinct reinforcing mechanisms and that the improvement of mechanical properties mainly depends on the nature of the filler and the dispersion and interaction with the matrix. Other factors such as shape, dimensions and degree of orientation of the nanofiller, as well as matrix morphology are discussed. A comparison between nanoindentation results and macroscopic properties is offered. Finally, indentation size effects are also critically examined. As a final point, the work suggests challenges and future perspectives in the application of depth-sensing instrumentation to characterize mechanical properties of polymer nanocomposite materials.

THE OVERLOOKED ROLE OF REDUCED GRAPHENE OXIDE IN THE REINFORCEMENT OF HYDROPHILIC POLYMERS

Graphene has stimulated intense research in the last years as filler in polymer matrices that can provide tailored functionalities in addition to enhanced mechanical properties. It is generally believed that the effective dispersion of graphene and the optimum interfacial interactions with the matrix are the key factors to achieve superior properties. Our work, carried out in collaboration with Drs. H. Salavagione, G. Martínez, G. Ellis and M. A. Gómez-Fatou (ICTP-CSIC), offers a novel understanding of the reinforcing effect of graphene in hydrophilic polymer matrices. Hydrophilic polymers such as poly(vinyl alcohol) (PVA) absorb water leading to plasticization with significant consequences on modulus and hardness. We have analysed the effect of incorporating a small amount of graphene (1.8 wt.%) covalently linked at molecular controlled locations to PVA on the surface mechanical properties measured by nanoindentation. It is found that highly hydrophobic graphene stabilizes the mechanical properties of PVA against moisture absorption. Storage modulus, hardness and creep properties of PVA remain unchanged with relative humidity in the range 29% – 56% when graphene is incorporated to the polymer matrix, while those of the neat material are reduced by approximately half of the original value. The changes in the mechanical properties obtained when reinforcing PVA with graphene have to be mainly attributed to the dramatic reduction in water uptake, while the commonly invoked effective filler–matrix load transfer only seems to play a secondary role.

Group of DYNAMICS AND STRUCTURE OF SOFT AND POLYMER MATTER (SOFTMATPOL)

NANOESTRUCTURATION OF SOFT CONDENSED MATTER WITH CONTROLLED MORPHOLGIES

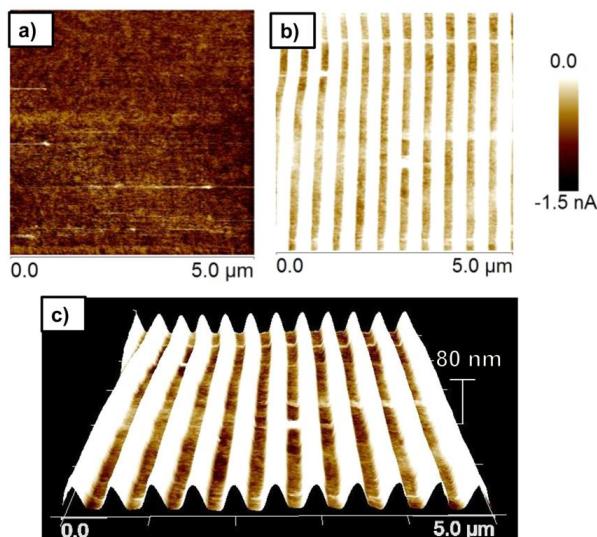
Polymer Nanogratings by nanoimprint lithography (NIL)

Nanostructured gratings of semicrystalline poly(propylene azelate) (PPAz) have been prepared over spincoated thin films by Nanoimprint Lithography (NIL). The structure and morphology of the gratings have been investigated by combining Atomic Force Microscopy (AFM) and Grazing Incidence X-ray Scattering at small angle (GISAXS) and

wide angle (GIWAXS). The results reveal that NIL affects significantly the orientation of the crystalline lamellae. PPAz gratings are more abundant in edge-on lamellae than the reference non-printed films. We attribute this effect to the PPAz preferential crystallization as flat-on lamellae on silicon surfaces either the stamp trench walls or the substrate surface. Thus, the flat-on lamellae on the trench walls appear to be edge-on lamellae in the printed sample. These results further support NIL as an appropriate procedure in order to control polymer crystal orientation.

Laser induced periodic surface structures (LIPSS) in semiconducting polymers

We have continued exploiting the possibilities of using lasers to nanostructuring the surface of thin polymer films. In cooperation with the group of Drs. M. Castillejo and E. Rebollar (IQFR-CSIC) we have succeeded in the nanofabrication induced by means of nanosecond laser pulses with different wavelengths of periodic surface structures (LIPSS) in semiconducting polymer films with application in organic solar cells. We have investigated the patterning of semiconducting poly(3-hexylthiophene) (P3HT) thin films by means of laser-induced periodic surface structures. Two different laser wavelengths, 266 and 532 nm, and a broad range of fluences and number of pulses have been used in order to optimize the LIPSS morphology. Ripples period and depth can be tuned by laser parameters. In particular, the high optical absorption of P3HT at 532 nm enables the formation of well ordered nanostructures with periodicities around 460 nm. Near edge X-ray absorption fine structure (NEXAFS) and Raman spectroscopy reveal a good chemical stability of P3HT thin films during LIPSS formation. Conducting atomic force microscopy (C-AFM) performed on the LIPSS reveals a higher electrical conduction in the trenches than in the ridge regions. Resonance Raman spectroscopy and grazing incidence wide-angle X-ray scattering (GIWAXS) indicate a loss of crystallinity of P3HT thin films during LIPSS formation, suggesting melting of the outer polymer surface. This effect produces ridges with molecular order lower than that of the original thin film. As a consequence of this transformation, the electrical conduction in the ridges becomes lower than that in the trenches.



C-AFM current images of a P3HT thin film measured at a constant bias of -5 V . (a) Nonirradiated film, (b) film with LIPSS fabricated at 532 nm , 26 mJ/cm^2 , and 4800 pulses. (c) Overlap of height and current images of P3HT with LIPSS.

Laser Fabrication of Polymer Ferroelectric Nanostructures for Nonvolatile Organic Memory Devices

Polymer ferroelectric laser-induced periodic surface structures have been prepared on ferroelectric thin films of a poly(vinylidene fluoride-trifluoroethylene) copolymer. Although this copolymer does not absorb light at the laser wavelength, LIPSS on the copolymer can be obtained by forming a bilayer with other light-absorbing polymers. The ferroelectric nature of the structured bilayer was proven by piezoresponse force microscopy measurements. Ferroelectric hysteresis was found on both the bilayer and the laser-structured bilayer. We show that it is possible to write ferroelectric information at the nanoscale. The laser-structured ferroelectric bilayer showed an increase in the information storage density of an order of magnitude, in comparison to the original bilayer.

Ferroelectricity and molecular dynamics of poly(vinylidenefluoride-trifluoroethylene) nanoparticles

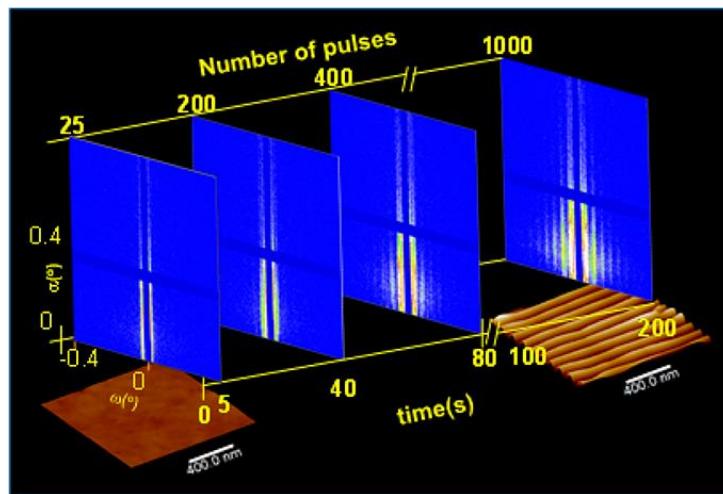
We have been able to prepare ferroelectric polymeric nanoparticles of a poly(vinylidene fluoride-trifluoroethylene) random copolymer, by dialysis nanoprecipitation. By this method semicrystalline particles with mean diameter of 280 nm , as revealed by atomic force microscopy, can be obtained. The ferroelectric nature at room temperature of the nanoparticles has been proven by piezoresponse force microscopy, differential scanning calorimetry, X-ray diffraction at wide angles and broad band dielectric spectroscopy. The poly(vinylidene fluoride-trifluoroethylene) nanoparticles exhibit a ferroelectric-to-paraelectric transition at lower temperature compared with the bulk. In the paraelectric phase

the nanoparticles show an intense dielectric relaxation process associated to the rotational motion of the dipoles within the paraelectric crystalline phase. The nature of this dielectric process is similar to that of the bulk.

Application of synchrotron light to the study of fundaments and homogeneity of LIPSS in polymers

An accurate mapping of the structural order of LIPSS in spin-coated thin polymer films has been performed via a microfocus beam grazing incidence small-angle X-ray scattering (μ GISAXS) scan, GISAXS modeling, and atomic force microscopy imaging all along the scanned area. This combined study has allowed the evaluation of the effects on LIPSS formation due to nonhomogeneous spatial distribution of the laser pulse energy, mapping with micrometric resolution the evolution of the period and degree of structural order of LIPSS across the laser beam diameter in a direction perpendicular to the polarization vector. These experiments go one step further toward controlling nanostructure formation in LIPSS through a deep understanding of the parameters that influence this process.

The formation of laser-induced periodic surface structures (LIPSS) on model spin-coated polymer films has been followed *in situ* by grazing incidence small-angle X-ray scattering (GISAXS) using synchrotron radiation. The samples were irradiated at different repetition rates ranging from 1 up to 10 Hz by using the fourth harmonic of a Nd:YAG laser (266 nm) with pulses of 8 ns. Simultaneously, GISAXS patterns were acquired during laser irradiation. The variation of both the GISAXS signal with the number of pulses and the LIPSS period with laser irradiation time is revealing key kinetic aspects of the nanostructure formation process. By considering LIPSS as one-dimensional paracrystalline lattice and using a correlation found between the paracrystalline disorder parameter, g , and the number of reflections observed in the GISAXS patterns, the variation of the structural order of LIPSS can be assessed. The role of the laser repetition rate in the nanostructure formation has been clarified. For high pulse repetition rates (i.e., 10 Hz), LIPSS evolve in time to reach the expected period matching the wavelength of the irradiating laser. For lower pulse repetition rates LIPSS formation is less effective, and the period of the ripples never reaches the wavelength value. Results support and provide information on the existence of a feedback mechanism for LIPSS formation in polymer films.



Sequence of GISAXS patterns acquired *in situ* as a function of both time and number of pulses for a PTT film laser irradiated with a laser repetition rate of 5 Hz.

STRUCTURE CONFINEMENT AND ELECTRICAL PROPERTIES IN CONJUGATED POLYMER BLENDS WITH APPLICATION IN ORGANIC SOLAR CELLS

A strong impact of crystal morphology on hole mobility is evidenced due to competition between phase separation and structure confinement in P3HT/PCDTBT heterojunctions. We find that domain sizes of both components decrease as film thickness decreases, suggesting an initial advantageous scenario for the efficiency of bulk heterojunction solar cells. However the P3HT/PCDTBT (1:1) films with a thickness of 165 nm and thicker present a dense crystal needle-like morphology while no evidence of needle-like motifs appears in the films 58 nm thick, indicating that confinement inhibiting crystallization takes place due to the very thin P3HT domains of only 40 nm in the thinner sample. The structural studies were correlated with nanoscale charge transport by conductive-AFM. A significant zero-field hole mobility increase is observed for the P3HT/PCDTBT films with increasing thickness. Even more interesting is the fact that a zero-field hole mobility increase of about two orders of magnitude is observed for P3HT domains in a 165 nm blend film compared to a neat P3HT film with similar thickness. This observation is related to the highly conductive network induced in P3HT by the presence of the PCDTBT phase, consisting of needle-like crystals growing from the P3HT domains and acting as bridges through the PCDTBT domains.

DYNAMICS UNDER CONFINEMENT IN SOFT CONDENSED MATTER AND POLYMER

'Jamming in polymer systems: X ray Photon Correlation Spectroscopy'

Continuing with the collaboration with the group of Prof. Mijangos, from ICTP-CSIC, we have studied the deswelling behavior of semi-interpenetrating polymer hydrogels of sodium alginate and poly(N-isopropylacrylamide) (PNIPAAm) containing iron oxide nanoparticles by means of X-ray photon correlation spectroscopy (XPCS). The experiments were carried out as a function of temperature starting from temperatures below the low critical solution temperature (LCST) of the materials to temperatures above their LCST. The hydrogels present a hyper-diffusive dynamics of similar nature as that found for the freeze-dried aerogels which has been attributed to their characteristic porous structure. The dynamics of the swollen samples is faster than that of the freeze-dried ones suggesting that water has an effect in accelerating the dynamics of the hydrogels. XPCS has been used to characterize the deswelling process as a function of temperature. Deswelling times for the different samples correlate well with the corresponding relaxation times of the relaxation processes measured by XPCS.

Dynamics and crystallization in polymer thin films

In collaboration with Dr. Simone Napolitano, from the Université Libre de Bruxelles, we have studied the thickness dependence of the thermal phase transition temperatures of poly(L-lactide acid) thin films supported onto solid substrates. The determination of the glass transition, cold crystallization and melting temperatures down to a thickness of 6 nm, permitted us to build up parameters describing glass stability and glass forming ability. We observed a strong influence of the film thickness on the latter, while the former is not affected by 1D confinement. Further experiments permitted us to highlight key structural morphology features giving insights to our ellipsometric results via a physical picture based on the changes in the free volume content in proximity of the supporting interfaces.

DEVELOPMENT OF NEW POLYMER COMPOSITES BASED ON PTT AND COPOLYMERS OF PTT-PTMO WITH DIFFERENT CARBON-BASED ADDITIVES

A comprehensive study was carried out on different polymer composites based on poly(trimethylene terephthalate) (PTT) and poly(trimethylene terephthalate-block-poly(tetramethylene oxide)) (PTT-PTMO) copolymers with carbon based nanoparticles such as single wall carbon nanotubes (SWCNT), expanded graphite (EG) and graphene nanoplatelets (GNP). Samples at different concentrations were obtained and their thermal properties (DSC), structural characterization (WAXS) an electrical properties (BDS) have been studied. Likewise, by combining additives with different dimensionality, i.e. SWCNT (1D) and GNP (2D) we have obtained hybrid nanocomposites. A synergistic effect between both types of additives was shown.

NEW BIODEGRADABLE POLYMERS

We have undertaken a study of two types of new biodegradable polymers: poly(propylene 1,4-trans-cyclohexandicarboxylate), poly(neopentyl 1,4-trans-cyclohexandicarboxylate) and their copolymers; and 2) triblock ABA copolymers, where A = polylactic acid and B = poly(propylene/neopentyl succinate) copolymer.

Both kinds of polymers are very interesting for applications ranging from packing to biomedicine. The work constitutes a basic research aimed at improving the understanding of phenomena that enable a controlled nanostructuring in three dimensions (bulk) of semicrystalline polymeric materials. In this context, the results can be expected to have a major impact on the manufacture of biocompatible polymeric films and fibres.

Group of BIOPHYSICS OF MACROMOLECULAR SYSTEMS (BIOPHYM)

SIMULATION OF SYNTHETIC MACROMOLECULAR SYSTEMS

Effect of short chain branches on the entanglement structure of polymers

Molecular dynamics simulations of the macromolecular conformation and melt dynamics for model polymers of different molecular weights have been carried out. The selected models are hydrogenated polybutadienes with a 2 % content of ethyl branches (PEB2) and linear polyethylene (PE). It has been shown that the density and chain stiffness are clearly affected by both the molecular weight and the presence of ethyl branches. Furthermore, the results obtained from the simulations on molecular size and, more remarkably, chain dynamics, perfectly match the neutron scattering in PEB2. We observe a clear chain contraction and a slow dynamics for the PEB2 with respect to the linear PE of the same molecular length. Using the Likhtmann-McLeish definitions, the obtained values of the entanglement relaxation time (τ_e) and the tube diameter (a) are in agreement with the available experimental data (rheology and neutron spin echo) as well as with those obtained by the simulations. Finally, a very good agreement of diffusion coefficients as a function of the molecular weight between simulations and experiments is observed. Therefore, there exists a clear difference between the results obtained for branched and linear polyethylene, accounting for a definitive effect of the short chain branching on the conformational properties and melt dynamics of polyolefins.

Understanding the polyethylene phase transitions by molecular dynamics simulations

Polymeric materials reveal interesting physical phenomena in the length scale from sub-nanometer up to microns or, alternatively, in the time scale from picoseconds to years. Covering these wide length and time scales demands the use of powerful experimental techniques, with the combination of complementary computational tools in order to effectively resolve the processes of interest. At this respect major advances in computational power, such as the use of GPU processors, and methodologies can nowadays help to face classical problems, and to establish a shared knowledge between theorists and experimentalists. We have performed simulations to capture the complex behavior of glass transition and crystallization processes at different cooling rates. We can draw the following general conclusions: a) The apparent glass transition and its dependence with the cooling rate are well described by MD simulations. In fact the extrapolated value at experimental conditions is close to that obtained for totally amorphous PE without crystalline constraints (Gordon-Taylor equation), b) for the first time the TraPPE-UA force field is employed to simulate the homogeneous early stages of the crystallization process of an entangled n-alkane. Basic experimental facts are correctly described by the simulations, primarily (i) the initial fold length expected for these high supercoolings, and (ii) the segregation of the systems in alternating ordered and disordered layers.

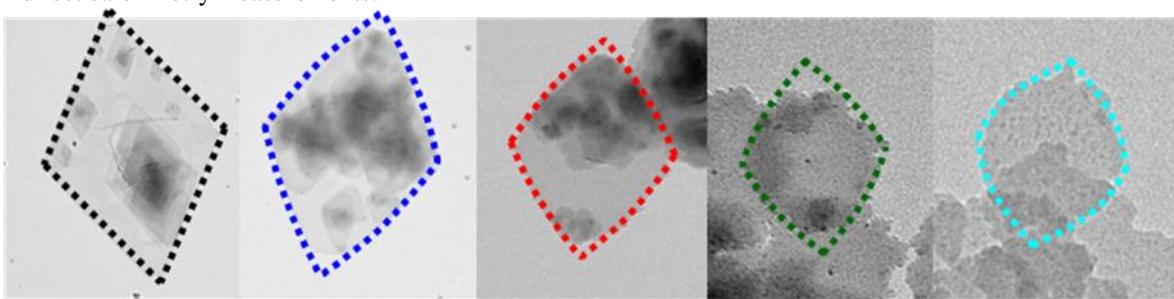
MOBILITY, ORDER AND NANOSTRUCTURE IN MACROMOLECULAR SYSTEMS

Effect of short chain branching in the miscibility of blends

The influence of the molecular architecture of linear low-density polyethylene (LLDPE) on melt miscibility with low-density polyethylene (LDPE) has been investigated. Different LLDPE resins with variable type and content of branches were blended at a given composition with the same LDPE. The rheology and different data-treatment methods based on mixture models suggest that the melt blend morphology is strongly dependent on the molecular architecture of the matrix, particularly on the amount of short chain branches. The properties of the blends in which the LLDPE sample possesses a high content of branches can be predicted by the miscible blend additivity rule. The blends in which the LLDPE had the lowest branch content were completely immiscible. In these cases the rheological properties showed values that are higher than expected for miscible blends, as predicted by the Palierne model. The molar mass and the type of comonomer in LLDPE do not play an important role in the melt morphology of the blends at the composition studied. Thus the level of branching in LLDPE is revealed as the molecular feature with the strongest influence on melt miscibility with LDPE.

Effect of short chain branching in the crystal habits of polyethylene single crystals

The influence of short-chain branching on the formation of single crystals at constant supercooling has been systematically studied in a series of model high-molecular-weight polyethylene samples. A strong effect of short-chain branching on the morphology and structure of single crystals has been observed. An increase of the axial ratio with short-chain branching content, together with a characteristic curvature of the {110} crystal faces are observed. To the best of our knowledge, this is the first time that this observation is reported in high-molecular-weight polyethylene. The curvature can be explained by a continuous increase in the step initiation—step propagation rates ratio with short-chain branching, which means that nucleation events are favored against stem propagation by the presence of chain defects. Micro-diffraction and WAXS results clearly indicate that all samples crystallize in the orthorhombic form. An increase of the unit cell parameter a_0 is detected, an effect that is more pronounced than in the case of single crystals with ethyl and propyl branches. The changes observed are compatible with an expanded lattice due to the presence of branches at the surface folding. A decrease in crystal thickness with branching content is observed as determined from shadow measurements by TEM. The results are in agreement with additional SAXS results performed in single crystal mats and with indirect calorimetry measurements.



TEM micrographs of PE single crystals with variable short chain branching degree and their calculated shapes represented as dotted outlines in selected crystals, after application of Shcherbina and Ungar's approach for asymmetric growth front

Physical properties and nanostructure of nanocomposites of poly- ϵ -caprolactone and carbon nanotubes

The synergistic effect that carbon nanotubes (CNTs) produce on the rheological properties and crystallization of poly- ϵ -caprolactone was also investigated. Multiwall CNTs were blended in the melt with the polymer in different compositions. AFM micrographs demonstrated an excellent CNT dispersion. The rheological and calorimetric properties of the nanocomposites were determined and the results compared to those obtained for neat resin. Basic

rheological properties and nucleation effects increased with the addition of CNTs in all cases. However, the increase was strongly dependent on the nature of the CNT (raw or coated by a polymeric material).

SIMULATION OF MACROMOLECULAR BIOLOGICAL SYSTEMS

Conformational analysis of GXG(X=D,N,C) tripeptides

The knowledge of the conformational preferences of small tripeptides is a key point to understand the initial stages of the protein folding process and finally the tertiary structure of such biopolymers. Aminoacids with short polar lateral chains such as Aspartic acid (D), Asparagine (N) and cysteine (C) are known to form part of coil motifs in protein structures. For this reason, they have been investigated in a simpler and controlled environment such as the GXG tripeptides (G: Glycine). The experiments show some controversy regarding the relative population of the different conformations. We are trying to shed some light on this point by means of theoretical determination of NMR coupling constants and IR spectra. For these tasks, we are using Density Functional Theory models that are well established in the spectroscopical properties field. Some preliminar results points to a necessary consideration of a simultaneous dependence of some J-coupling constants on the two backbone dihedral angles (ϕ, ψ).

Simulation of hydrodynamic properties on protein complexes

The interests to determine the hydrodynamics properties of proteins is connected to the fact that protein bioactivity usually happens in water environment. The biosystem selected was the complex formed by the Epithelial Growth Factor Receptor ErbB2 and the Trastuzumab monoclonal antibody. This complex is a target in advanced cancer therapies. In connection with the experiments that are being performed at our group we are carrying out a simulation protocol to get those hydrodynamics properties comparable to the experiomental data. The computational methodology consists of atomistic molecular dynamics simulations to get representative structures of the molecular complexes followed by hydrodynamic properties evaluation on each structure using boundary element methods. The calculated properties are in good agreement with the experiments provided that the protein structures included glycosylation at the corresponding N-site aminoacids.

Multiscale simulation of protein complexes

The ErbB2-Trastuzumab complex is a very large system which may not be adequately sampled by atomistic simulations. We have carried out a multiscale protocol to enlarge the conformational space sampled by simulation. In this protocol, we mapped the atomistic model in a coarse-grained representation which allows larger molecular dynamics simulation times to be performed. The resulting structures were mapped back to atomistic detail where further refinement was done by performing short dynamics.

HYDRODYNAMICS OF PROTEINS AND BIOMACROMOLECULAR COMPLEXES

The study of the structure and biophysical properties of biomacromolecular complexes as proteins leads to a deeper knowledge about their function in their biological context. To this end we have focused our interest in different biological systems: (i) Epithelial Growth Factor Receptors (EGFR or ErbB); (ii) HIV capsid protein complexes (gp proteins); (iii) Virus Like Particles (VLPs); (iv) reflectin and its mutants. These studies were performed in collaboration with other groups, both international (Sino Biological Ltd., Beijing) and national (IQFR/CSIC), specifically in the study of membrane proteins involved in cell signaling processes related to cancer or HIV virus; and proteins responsible for specific responses to visible light in certain animals (reflectin). We are providing information on their ability to form complexes with antibodies used in cancer therapy such as Trastuzumab (in the case of EGFR proteins); on the flexibility of macromolecular complexes (in the case of membrane glycoproteins of the HIV virus); on the maturation of VLPs used as carriers in gene therapies; and on self-assembly processes for the formation of complex networks (in the case of mutants reflectin).

CAPÍTULO 3
PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN

CHAPTER 3
RESEARCH PROJECTS

3.1 DPTO. DE QUÍMICA Y FÍSICA TEÓRICAS / THEORETICAL PHYSICS AND CHEMISTRY

De campos medios a soluciones exactas en sistemas mesoscópicos fuertemente correlacionados.

Code or Reference: FIS2012-34479.

Funding Institution: MINECO.

Main Researcher: Jorge Dukelsky / Participation: R.A. Molina, C. Esebbag, Daniel Huerga.

Duration: January 2013-December 2015.

Objectives: The central goal of this project is the development and application of new techniques extending mean field approaches, as well as analytical and numerical exact solutions, to strongly correlated mesoscopic and low dimensional systems.

Quantum information technologies in Madrid+ (QUITEMAD+). – Participation

Code or Reference: S2013/ICE-2801.

Funding Institution: Comunidad Autónoma de Madrid

Main Researcher: Miguel Ángel Martín-Delgado (UCM) / Participation: J. Dukelsky, R.A. Molina, J. Mur-Petit

Duration: January 2015-December 2016.

Budget: 580000 €

Objectives: Quantum computation. Quantum simulation. Quantum cryptography. Quantum sensing. Quantum Artificial Intelligence

Descripción teórica de estructuras nucleares exóticas y reacciones.

Code or Reference: FIS2011-23565.

Funding Institution: MINECO.

Main Researcher: Pedro Sarriugure Suquilbide.

Duration: January 2012-December 2015.

Objectives: Beta-decay of exotic nuclei. Lepton scattering from nuclei. Three-body systems, structure and reactions.

Núcleos exóticos: Estructura, reacciones e implicaciones de interés astrofísico.

Code or Reference: FIS2014-51.971-P.

Funding Institution: MINECO.

Main Researcher: Eduardo Garrido Bellido.

Duration: January 2015-December 2017.

Objectives: Beta-decay of exotic nuclei. Lepton scattering from nuclei. Three-body systems, structure and reactions.

Gravedad y Universo Cuántico: Cosmología de Lazos, Agujeros Negros y Fractales.

Code or Reference: FIS2014-54800-C2-2-P.

Funding Institution: MINECO.

Main Researchers: Guillermo A. Mena Marugán and Gianluca Calcagni.

Duration: January 2015-December 2017.

Objectives: Analysis of the consequences of Loop Quantum Cosmology and of Group Field Theory for cosmological perturbations. Quantization of spherically symmetric spacetimes and black holes in Loop Quantum Gravity. Study of nonlocal quantum gravity of exponential type as well as in multi-scale spacetimes. Development of approximate and numerical methods in quantum cosmology.

Cosmología Cuántica de Lazos y Agujeros Negros.

Code or Reference: FIS2011-30145-C03-02.

Funding Institution: MINECO.

Main Researcher: Guillermo A. Mena Marugán.

Duration: January 2012-December 2015.

Objectives: Research in Loop Quantum Cosmology, including inhomogeneities. Investigation of the physical predictions. Quantum Field Theory in curves spacetimes with applications in Cosmology and in Black Hole Physics.

Caracterización espectroscópica de moléculas prebióticas no-rígidas de importancia astrofísica mediante métodos ab initio altamente correlacionados.

Code or Reference: FIS2013-40626-P.

Funding Institution: MINECO.

Main Researcher: María Luisa Senent Diez.

Duration: January 2014-December 2016.

Objectives: The study of the far infrared spectra of non-rigid molecules of astrophysical interest using highly correlated ab initio methods.

CAPZEO-Microscopic investigations of CO₂ capture and scattering on liquid gas interface.*Code or Reference:* Marie Curie Action FP7-PEOPLE-2012-IRSES.*Funding Institution:* European Community (Seventh Framework Programme).*Main Researcher:* M. Hochlaf / IP IEM: M.L. Senent.*Duration:* 2012-2016.**Anion CosChem Exploring the Chemistry and Spectroscopy of Cosmic Anions.***Code or Reference:* Anion Cos Chem ANR-14-CE33-0013.*Funding Institution:* Agence National de la Recherche ANR (Francia).*Main Researcher:* Ludovic Biennier (Instituto de Física de Universidad de Rennes).*Duration:* 2014-2018.**Acción COST Our Astro-Chemical History.***Code or Reference:* CM1401.*Funding Institution:* COST, UE.*Main Researcher:* L. Wiesenfeld (Observatorio de Grenoble, Francia). Management committee (Spain): M.L.Senent, O. Roncero.*Duration:* 2015-2018.**Acción COST Molecules in Motion, MOLIM.***Code or Reference:* CM1405.*Funding Institution:* COST, UE.*Main Researcher:* A.G. Csázár (U. Eotvos de Budapest, Hungria). Management committee (Spain): M.L.Senent, M.P. de Lara.*Duration:* 2015-2019.**Simulación cuántica de modelos en red con fibras ópticas.***Code or Reference:* FIS2014-61633-EXP.*Funding Institution:* MINECO.*Main Researcher:* Rafael Alejandro Molina Fernández.*Duration:* September 2015-August 2017.*Budget:* 48000 €*Objectives:* Experimental simulation of quantum tight-binding models in optical fiber bunches**Vibronic models for efficient energy transfer.***Code or Reference:* i-LINK0938.*Funding Institution:* CSIC.*Main Researcher:* Rafael Alejandro Molina Fernández.*Duration:* January 2015-December 2016.*Budget:* 12600 €*Objectives:* Theoretical study of excitonic dynamics in molecular crystals with vibrational modes with applications to photosynthesis and artificial light-harvesting devices.**Gravitación y teoría de campos: cuantización, simetría y mecánica estadística.***Code or Reference:* FIS2014-57387-C3-3-P.*Funding Institution:* MINECO.*Main Researcher:* Eduardo Jesús Sánchez Villaseñor y Jesús Salas Martínez (participation of F. Barbero and J. Margalef).*Duration:* January 2015-December 2017.*Objectives:* Research in Gravity, Quantum Field Theory, symmetries, gauge theories, black hole physics and statistical mechanics.**Fundamentos teóricos de la gravedad cuántica de lazos: métodos de teoría de campos y física estadística, álgebra de ligaduras y horizontes cuánticos.***Code or Reference:* FIS2012-34379*Funding Institution:* MINECO.*Main Researcher:* Eduardo Jesús Sánchez Villaseñor (Fernando Barbero is part of the research team).*Duration:* January 2013-December 2014 (extended until December 2015).*Objectives:* Research in quantum gravity (black holes), quantum field theory and statistical mechanics.**Electroweak processes in systems bound by the strong interaction.***Code or Reference:* Marie Curie Action "International Outgoing Fellowships for Career Development" FP7-PEOPLE-2011-IOF ELECTROWEAK 298364.

Funding Institution: European Union (Research Executive Agency under Framework Programme 7).

Main Researcher: Óscar Moreno.

Duration: May 2013 - April 2016.

Budget: 256000 €

Objectives: Theoretical description of electroweak processes (beta decays, lepton scattering) in systems bound by the strong interaction.

3.2 DPTO. DE ESPECTROSCOPIA NUCLEAR, VIBRACIONAL Y DE MEDIOS DESORDENADOS / NUCLEAR, VIBRATIONAL AND DISORDERED MEDIA SPECTROSCOPY

Nanobioespectroscopía (Raman y Fluorescencia): Nanosistemas orientados a la biodiagnosis y la teranóstica.

Code or Reference: FIS2014-52212-R

Funding Institution: Ministerio de Economía y Competitividad.

Main Researcher: Santiago Sánchez Cortés.

Duration: January 2015-December 2017.

Objectives: Fabrication, characterization and functionalization of metal plasmon nanoparticles with advanced technologies to be applied in the detection of drugs and biomolecular diagnosis.

GANAS Detección de radiación Gamma utilizando Material Centelleo Avanzado y Novedoso.

(<http://www.targisol.csic.es/ganas/>)

Code or Reference: PRI-PIMNUP-2011-1333.

Funding Institution: Ministerio de Ciencia e Innovación.

Main Researcher: Olof Tengblad.

Duration: November 2011-December 2015.

Objectives: R & D for the development of scintillator materials.

Estudios Experimentales del Núcleo Atómico y I+D para R3B@FAIR.

Code or Reference: FPA2012-32443.

Funding Institution: Ministerio de Economía y Competitividad.

Main Researcher: Olof Tengblad.

Duration: January 2013-March 2016.

Objectives: Nuclear structure studies of drip-line nuclei by experimental methods. Detector and electronic developments for the detection of high energy gammas and protons at FAIR.

Materiales Carbonosos Nanoestructurados para Atrapado y Confinamiento Molecular.

Code or Reference: MAT2012-33633.

Funding Institution: Ministerio de Economía y Competitividad.

Main Researcher: Carlos Cabrillo García.

Duration: January 2012-December 2016.

Objectives: Study of materials and processes relevant for molecular trapping and confinement.

Diseño y construcción de un sistema para el diagnóstico de la Enfermedad de Alzheimer basado en Espectroscopía Raman Laser.

Code or Reference: IPT-2012-0769-010000.

Funding Institution: Ministerio de Economía y Competitividad-FEDER.

Main Researcher: Pedro Carmona Hernández.

Duration: January 2013-April 2015.

Objectives: Design and construction of a system for diagnosis of Alzheimer's disease based on the use of biomarkers detected by Raman spectroscopy.

Desarrollo de un sistema Raman automatizado para el diagnóstico de tumores (ONCORAMAN).

Code or Reference: RTC-2014-1842-1

Funding Institution: Ministerio de Economía y Competitividad.

Main Researcher: Pedro Carmona Hernández.

Duration: January 2015-March 2016.

Objectives: Development of an automated Raman system for diagnosing tumors on the basis of spectral biomarkers.

Nuclear structure research in exotic nuclei: Experimental and theoretical studies and instrumental developments for AGATA.

Code of Reference: FPA2014-57196-C5-4-P

Funding Institution: Ministerio de Economía y Competitividad

Main researcher: Andrea Jungclaus

Duration: 2015-2017

Nanoantenas Ópticas Plasmónicas y Semiconductoras (NANOPLAS+).

Code or Reference: FIS2012-31070.

Funding Institution: Ministerio de Economía y Competitividad.

Main Researcher: José A. Sánchez Gil.

Duration: January 2012-December 2016.

Objectives: To investigate theoretically nanophotonic processes mediated by the excitation of resonances (plasmonic, magnetic, guided/leaky modes) on metallic, semiconductor, and hybrid nanostructures (nanoantennas).

Red de Excelencia CONSOLIDER en METAMATERIALES (RedMETA).

Code or Reference: TEC2015-69195-REDC.

Funding Institution: Ministerio de Ciencia e Innovación. Programa Consolider-Ingenio.

Main Researcher: José A. Sánchez Gil (Subproyecto CSIC).

Coordinator: Javier Martí Sendrá (NTC-UPV).

Duration: 2015-2016.

Objectives: To consolidate an excellence network on Metamaterials in Spain, investigating fundamental processes throughout the EM spectral range and in Acoustics, and developing applications for photonic and acoustic devices.

Nanofuentes Fototérmicas Plasmónicas.

Code or Reference: 2015CD0011.

Funding Institution: i-COOP LIGHT 2015 (CSIC).

Main Researcher: José A. Sánchez Gil.

Duration: October 2015-December 2016.

Objectives: To investigate theoretically and experimentally metallic nanostructures as thermal sources at the nanoscale upon illumination at plasmon resonance conditions, developing the research skills of PhD students from the foreign institution (CICESE, Ensenada, México).

Controlled Laser Assisted Fabrication of Nanostructures: Laser-Material Interactions and Plasma Processes.

Code or Reference: CTQ2013-43086.

Funding Institution: Ministerio de Ciencia en Innovación.

Main Researcher: Marta Castillejo Striano.

Duration: January 2014-December 2016.

Objectives: This Project aims at achieving controlled fabrication of nanomaterials and nanostructures with specific functionalities through the use of direct laser irradiation and laser ablation and deposition. We propose to “guide” the micro and nanofabrication by a better fundamental understanding of the physical-chemistry of the laser-material interactions and by the study of the properties of the plasma produced in the ablation event.

Nuevas matrices de cemento elaboradas a partir de cenizas silico-aluminosas procedentes de la activación térmica controlada de estériles de carbón.

Code or Reference: MAT2012-37005-C03-01.

Funding Institution: Ministerio de Ciencia e Innovación.

Main Researcher: Moisés Frias Roja (participation: Sagrario Martínez Ramírez).

Duration: January 2013-December 2015.

Objectives: New materials development with sustainability proposal.

Tecnologías y conservación de materiales del patrimonio. Geomateriales 2.

Code or Reference: S2013/MIT-2914

Funding Institution: Comunidad Autónoma de Madrid (CAM).

Main Researcher: Rafael Fort (participation: Sagrario Martínez Ramírez)

Duration: October 2014-October 2018.

Objectives: To understand geomaterial alteration processes and mechanisms, developing strategies for their protection and conservation by enhancing their resistance to decay and, consequently, their durability.

Diseño y Aplicación de Actividades Virtuales. Análisis de Datos de Aprendizaje relacionados con la Utilización de dichas Actividades (Learning Analytics)

Code or Reference: PIMCD263

Funding Institution: Universidad Complutense de Madrid.

Main Researcher: Beatriz López Ruiz (participation: M^a Paz Sevilla Sierra)

Duration: July 2014-June 2016.

Objectives: Analysis of Data on Learning activities.

PROYECTOS DE DIVULGACIÓN CIENTÍFICA

Grupo TeatrIEM: El Teatro como instrumento eficaz de acercamiento de la Sociedad al pensamiento científico

Code or Reference: FCT14-8138

Funding Institution: Fundación Española para la Ciencia y Tecnología.

Main Researcher: José V. García Ramos

Duration: September 2014- March 2016.

Objectives: Consolidation of the TeatrIEM Group and staging of a performance about the Science.

3.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS

Estudio de sistemas de interés atmosférico y astrofísico mediante espectroscopía láser.

Code or Reference: FIS2012-38175

Funding Institution: Ministerio de Economía y Competitividad.

Main Researcher: Dionisio Bermejo Plaza.

Duration: January 2013-December 2015 (extended to December 2016).

Objectives: To employ the high resolution and high sensitivity laser spectroscopy techniques that we have set up in our laboratories to study gas-phase molecular systems that are relevant in atmospheric, planetologic or astrophysical studies. The goal of this research is to obtain spectroscopic parameters that are of use in the interpretation of current observing missions, and to verify formalisms that foster the knowledge of molecular collisions physics.

Gas and Dust from the Stars to the Laboratory: Exploring the NanoCosmos.

Code or Reference: ERC-2013-SyG-610256 NANOCOSMOS

Funding Institution: EUROPEAN RESEARCH COUNCIL - SYNERGY GRANTS.

Main Researcher: José Cernicharo Quintanilla

Main Researcher: (IEM-CSIC) Víctor José Herrero Ruiz de Loizaga.

Duration: August 2014-July 2020.

Objectives: European collaboration dedicated to joint investigation, including astronomical observations, modelling and top level experiments to produce star dust analogues in the laboratory and identify the key species and steps that govern their formation.

Modelos experimentales y teóricos para sistemas astrofísicos y atmosféricos.

Code or Reference: FIS2013-48087-C2-1-P

Funding Institution: Ministerio de Economía y Competitividad.

Main Researchers: Víctor J. Herrero, Isabel Tanarro.

Duration: January 2014- December 2016.

Objectives: Laboratory and theoretical investigation of ices of astrophysical and atmospheric interest, and more specifically: processing of prebiotic molecules, models for TransNeptunian Objects; plasmas for analogs of interstellar carbonaceous dust, and atmospheric particles of different types.

Molecular Astrophysics: The Herschel and ALMA Era.

Code or Reference: CSD2009-00038.

Funding Institution: MICINN. CONSOLIDER-INGENIO 2010 Program.

Main Researcher: (IEM-CSIC) Salvador Montero Martín.

Coordinator: José Cernicharo Quintanilla.

Duration: January 2010-December 2016.

Objectives: Several key topics in the areas of molecular complexity in space and in the chemistry of regions of star and planet formation: water in the universe, carbon chemistry, deuterium, chemical complexity, ionization and photodissociation, oxygen and nitrogen chemistry, molecular tracers of shocks, interstellar dust grain chemistry.

The rotational torsional spectrum of mono-deuterated dimethyl ether (DME) with backbones 12C-O-12C, 12CO-13C and 13C-O-13C.

Code or Reference: 20150351.

Funding Institution: SOLEIL Synchrotron.

Main Researcher: Pia Kutzer.

(IEM participants: J.M. Fernández).

Duration: September 2015-February 2016.

Objectives: High resolution spectrum of mono-deuterated species of DME in the spectral range from 100 cm⁻¹ to 700 cm⁻¹, to identify the lowest excited torsional modes and their coupling with the bending mode.

Thunderstorm effects on the atmosphere-ionosphere system.

Code or Reference: TEA-IS, (09-RNP-101)

Funding Institution: ESF Research Networking Programme.

Main Researchers: Torsten Neubert and Francisco J. Gordillo-Vázquez.

(IEM Participants: Isabel Tanarro and Víctor J. Herrero).

Duration: May 2011-May 2016.

Objectives: Theoretical, laboratory and field studies of surprising phenomena observed above thunderstorms in the last twenty years: huge electric discharges in the stratosphere and mesosphere, and energetic bursts of gamma-radiation, which can improve the present knowledge of thunderstorms and affect the stratospheric and low ionospheric chemistry.

Our Astro-Chemical History.

Code or Reference: CMST COST Action CM1401

Funding Institution: European Cooperation in Science and Technology

Main Researchers: Laurent Wiesenfeld

Spanish delegates: Octavio Roncero and M^a Luisa Senent

(IEM Participants: José M. Fernández, Isabel Tanarro, Vicente Timón and Víctor J. Herrero).

Duration: November 2014-November 2018.

Fenómenos Coherentes En Gases De Moléculas Dipolares Ultrafrías.

Code or Reference: FIS2010-18799

Funding Institution: MICINN.

Main Researcher: Julio Santos Gómez.

Duration: January 2011-June 2015.

Objectives: Theoretical study of the simultaneous control of rotational and translational degrees of freedom of ultracold dipolar molecules, using static and time-dependent electromagnetic fields.

Experimental study of molecular interactions: water, hydrogen and oxygen.

Code or Reference: FIS2013-48275-C2.

Funding Institution: MICINN.

Main Researcher: Guzmán Tejeda Gala and Salvador Montero Martín.

Duration: January 2014-December 2016.

Objectives: State-to-state rate coefficients for inelastic collisions of H₂O with He and H₂, and of O₂ with He at low temperature, homogeneous clustering of H₂O and O₂.

Microscopic investigations of CO₂ capture and scattering on liquid gas interface.

Code or Reference: PIRSES-GA-2012

Funding Institution: International Research Staff Exchange Scheme, EU Marie Curie Action

Main Researchers: David. Benoit, María Luisa Senent, Majdi Hochlaf and Najia Komiha.

(IEM Participants: Vicente Timón).

Duration: October 2012-October 2016.

Objectives: Work on the electronic structure calculations necessary to model the adsorption of CO₂ on the Zeolitic Imidazolate Frameworks (ZIFs) at the atomic level and theoretical study of CO₂ scattering on a liquid-gas interface at the microscopic level.

Estudio de procesos atmosféricos del yodo con implicaciones climáticas.

Code or Reference: CGL2013-48415-C2-1-R

Funding Institution: Ministerio de Economía y Competitividad.

Main Researchers: Óscar Gálvez González.

Duration: January 2014- November 2015.

Objectives: Laboratory and theoretical investigation of aerosols of atmospheric interest containing iodinated compounds. We will determine the reactivity of this kind of aerosols with a series of atmospheric pollutants and its interaction with light.

¿Qué ocurre en nuestra Atmósfera y cómo influye en el Cambio Climático?

Code or Reference:

Funding Institution: FECYT - www.precipita.es - Proyecto Crowdfunding.

Main Researchers: Óscar Gálvez González.

Duration: March 2015- December 2015.

Objectives: Laboratory and theoretical investigation of aerosols of atmospheric interest containing iodinated compounds. We will determine the reactivity of this kind of aerosols with a series of atmospheric pollutants and its interaction with light.

Determination of the photoionization spectra of atmospherically relevant iodine oxides compounds.

Code or Reference: 20150075

Main Researchers: Óscar Gálvez González.

Funding Institution: SOLEIL Synchrotron, France

Duration: 30th of September 2015 – 5th-of October 2015.

Objectives: Acces to the DESIRS line in the French SOLEIL syncrotron to record the photoionization spectra of I₂O₅ and I₂O₄, being the last one the most likely building block molecules of iodine oxide particles. In addition, to record the ionization spectrum of the mixtures of iodine oxide compounds formed in the reaction of I₂ + O₃.

EAGER: Polarimetric-Raman Lidar for Tropospheric Ice and Liquid water fraction.

Code or Reference: 1443222

Main Researchers: G.J. Fochesatto.

(IEM Participants: Óscar Gálvez González, Rafael Escibano).

Funding Institution: NSF-US National Science Foundation. AGS - GEO/ATM Atmospheric Chemistry Division.

Duration: May 2014-April 2016.

Objectives: Demonstrate the feasibility of Raman spectroscopy combined with polarimetric Lidar to identify the fraction of ice, liquid and water vapor on tropospheric aerosols and cloud layers.

3.4 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

Nanofabricación de Estructuras Poliméricas con Morfología Controlada: de las bases Físicas a las Aplicaciones.

Code or Reference: MAT2012-33517.

Funding Institution: Ministerio de Ciencia e Innovación.

Main Researcher: Tiberio A. Ezquerra.

Duration: January 2013-December 2015.

Objectives: To advance in the general understanding of the underlying physics involved in the integration of polymer nanotechnology in the production at nanoscale of functional nanomaterials and devices.

Aproximación dinámica al estudio de procesos de generación de nanoestructuras y transferencia de información en sistemas macromoleculares.

Code or Reference: MAT2012-36341

Funding Institution: Ministerio de Ciencia e Innovación.

Main Researcher: Javier Martínez de Salazar Bascuñana.

Duration: January 2013-December 2015.

Objectives: This project of basic character, but with undoubted repercussions of application in the field of the synthetic and biological macromolecules, approaches on the one hand, the processes of formation of nanostructure in polyolefinic systems in which diverse macromolecular architectures are involved and, for other one, the transfer of chemical information at the interface defined by the cell membrane.

Biofísica estructural de proteínas mediadoras en procesos de transferencia de información a través de la membrana celular.

Code or Reference: PIE201360E097

Funding Institution: Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC)

Main Researcher: Javier Martínez de Salazar Bascuñana.

Duration: January 2014-December 2015.

Objectives: This project is focussed in the problem of the transfer of chemical information at the interface defined by the cell membrane using the similar methodologies that the used by the group for the study of synthetic macromolecules.

Control of the nanostructure in polymers with applications in energy. Basic implications in their physical properties and their applicability.

Code or Reference: MAT2014-59187-R

Funding Institution: MINECO.

Main Researcher: Aurora Nogales/Mari Cruz García.

Duration: January 2015-December 2017.

Objectives: To obtain deeper knowledge in the understanding of self-assembly phenomena in polymers with potential applications in energy and to control those phenomena in confinement conditions, with the aim of improving their performances.

Propiedades a la nanoscala de nanocomuestos poliméricos jerárquicos basados en grafeno.

Code or Reference: MAT2013-47898-C2-1-R

Funding Institution: MINECO

Main Researcher: Araceli Flores Aguilar-Amat.

Duration: January 2014-December 2016.

Objectives: Development of new graphene-based polymer nanocomposites with special emphasis in novel hierarchical architectures with improved mechanical properties for their potential application in the transportation industry.

Nanoestructuración de polímeros y sistemas híbridos: Una vía sinérgica hacia la multifuncionalidad.

Code or Reference: MAT2011-23455.

Funding Institution: Ministerio de Ciencia e Innovación.

Main Researcher: Mari Cruz García-Gutiérrez.

Duration: January 2012-December 2015.

Objectives: The purpose of the project is to study physical processes such as dewetting, crystallization, self-assembly, directional-assembly or molecular dynamics, which undergo in polymer systems or polymer composites under spatial confinement. The final objective is to be able to tune the intrinsic morphology of those systems in order to optimize their applications in optoelectronic devices.

Design and application of structure-property relationship methods to the functionality study of macromolecular model materials.

Code or Reference: RYC-2011-09585.

Funding Institution: Ministerio de Ciencia e Innovación.

Main Researcher: Javier Ramos Díaz.

Duration: January 2012-December 2016.

Objectives: Development and implementation of computer codes to study multiscale properties in macromolecules.

PROYECTOS CON LA INDUSTRIA / PROJECTS WITH INDUSTRIAL COMPANIES

Developing Monte Carlo code to simulate polyolefins and their copolymers.

Code or Reference: 010103150002

Company: MITSUI CHEMICALS, INC. (Japan)

Main Researcher: Javier Ramos Díaz.

Duration: February 2015-April 2016.

Objectives: Implementation of MC moves to study polyolefins of different molecular architecture.

CAPÍTULO 4
COOPERACIÓN CIENTÍFICA

CHAPTER 4
SCIENTIFIC COOPERATION

4.1 CONGRESOS Y REUNIONES / CONGRESSES AND MEETINGS

4.1.1 DPTO. DE QUÍMICA Y FÍSICA TEÓRICAS / THEORETICAL PHYSICS AND CHEMISTRY

3rd EFI Winter Conference on Quantum Gravity (*International non-UE congress*), Tux (Austria), 16th-20th of February 2015.

- *Mukhanov-Sasaki Equations in Loop Quantum Cosmology* (Oral contribution), Laura Castelló Gomar, Mercedes Martín-Benito, Guillermo A. Mena Marugán, and Javier Olmedo.
- *More Information about the Early Universe than Meets the Eye* (Oral contribution), Ana Blasco, Luis J. Garay, Mercedes Martín-Benito, and Eduardo Martín-Martínez.
- *Effective Homogeneous and Isotropic Scenarios Emerging from States of the Hybrid Gowdy Model* (Oral contribution), Beatrix Elizaga Navascués, Mercedes Martín-Benito, and Guillermo A. Mena Marugán.

APS March Meeting 2015, San Antonio (USA), 2nd-6th of March 2015.

- *Excitonic and marginal Fermi liquid instabilities in 2D and 3D Dirac semimetals* (Oral contribution), José González.

7th Jerte Advanced Relativity Meeting (*Local congress*), Navaconcejo, Cáceres 24th-27th of March 2015.

- *Holography and the Large Number Hypothesis* (Oral contribution), Guillermo A. Mena Marugán.
- *Do stars die too long?* (Oral contribution), Carlos Barceló, Raúl Carballo-Rubio, Luis J. Garay, and Gil Jannes.
- *A Glimpse of the Early Universe without Real Light* (Oral contribution), Ana Blasco, Luis J. Garay, Mercedes Martín-Benito, and Eduardo Martín-Martínez.
- *Modified FLRW Dynamics of Quantum Gowdy States* (Oral contribution), Beatrix Elizaga Navascués, Mercedes Martín-Benito, and Guillermo A. Mena Marugán.
- *Cosmological constant* (Oral contribution), Gianluca Calcagni.

IberiCos 2015: X Iberian Cosmology Meeting (*International EU congress*), Aranjuez, 30th of March-1st of April 2015.

- *Cosmology and quantum gravities: Where are we?* (Invited talk), Gianluca Calcagni.

Frontiers in Quantum Simulation with Cold atoms (*Intenational non-UE congress*), Seattle (WA, USA), 30th March-2nd of April 2015.

- *Chiral bound states in the continuum* (Poster), Jordi Mur, and Rafael A. Molina.

AMOC 2015 “Anharmonicity in medium-sized molecules and clusters” (*International non-UE congress*), Madrid (Spain), 26th-30th of April 2015.

- *Small linear carbon chains: vibrational and electronic states* (Poster), R.Boussassi, R.Domínguez-Gómez, A.Benidar, J. Cernicharo, and M.L.Senent.
- *Highly correlated ab initio calculations of non-rigid molecules: ethylene glycol* (Poster), R. Boussassi, M.L.Senent, and N.Jaïdane.
- *Ab initio Study of the Interactions of Imidazole-SF₆ and imidazole-CH₄ Complexes* (Poster), S.Dalbouha, R.Boussassi, V. Timón, M.L. Senent, N.Komiha, and N.Jaïdane.
- *Theoretical spectroscopic characterization at low temperatures of dimethylsulfoxide* (Poster), S.Dalbouha, M.L.Senent, A.Cuisset and, D. Sadovskii.
- *A new theoretical approach of amelioration the CO₂ uptake efficiency of ZIF. The substitution of imidazole by different function* (Poster), M. Salah, S.Dalbouha, K. Marakchi, N.Komiha, and M.L. Senent.
- *Theoretical study of the photodissociation of the methyl radical* (Poster), A. Zanchet, A. García Vela, M.L. Senent, R.de Nalda, and L.Bañares.
- *Predissociation dynamics of the methyl radical from the 3p_z Rydberg state* (Poster), J. Woodhouse, G. Balerdi, R. de Nalda, A. Zanchet, M.L. Senent, A. García-Vela, and L. Bañares.

Workshop on coherent energy transport and optimization in photosynthesis (*Intenational non-UE congress*), Singapore, 1st-3rd of May 2015.

- *Localization and topology of excitons in chlorosomes* (Oral contribution), Rafael A. Molina, E. Benito-Matías, A. Somoza, L. Chen, and Y. Zhao.

The 21st International Conference on few-body problems in Physics (FB21) (*International non-UE congress*), Chicago (USA), 18th-22nd of May 2015.

- *Rotational character of the ¹²C spectrum investigated through inelastic cross sections via photon emission* (Invited talk) E. Garrido.

COST Action Our Astrochemical History CM1401 (*International non-EU congress*), Prague (Czech Republic), 25th-29th of May 2015.

- *Small linear carbon chains: vibrational and electronic states* (Póster), R.Boussassi, R.Domínguez-Gómez, A.Benidar, J. Cernicharo, and M.L.Senent.

International Nuclear Physics Conference: Nuclear Structure and Dynamics III (*UE congress*), Portoroz (Slovenia), 14th-19th of June 2015.

- *Beta-decay properties of neutron-deficient Pt, Hg, and Pb isotopes* (Oral contribution), P. Sarriguren.

34th International Workshop on Nuclear Theory (*UE congress*) Rila (Bulgaria), 21st-27th of June 2015.

- *Temperature dependence of the symmetry energy in finite nuclei* (Invited talk), M.K. Gaidarov, A.N. Antonov, D. N. Kadrev, P. Sarriguren, and E. Moya de Guerra.

LOOPS'15 (*International non-UE congress*), Erlangen (Germany), 6th-10th of July 2015.

- *Approximate Solutions of the Hybrid Quantum Gowdy Model with FRW Dynamics* (Oral contribution), Beatriz Elizaga Navascués, Mercedes Martín-Benito, and Guillermo A. Mena Marugán.
- *Quantization of scalar fields coupled to point masses* (Oral contribution), J. Fernando Barbero G., Benito Juárez-Aubry, Juan Margalef-Bentabol, and Eduardo J. S. Villaseñor.

14th Marcel Grossmann Meeting (*Intenational non-UE congress*), Roma (Italy), 12th-18th of July 2015.

- *Do stars die too long?* (Invited talk), Carlos Barceló, Raúl Carballo-Rubio, Luis J. Garay and Gil Jannes.
- *Fock quantization of field theories coupled to point particles.* (Oral contribution), J. Fernando Barbero G., Benito Juárez-Aubry, Juan Margalef-Bentabol, and Eduardo J. S. Villaseñor.

ICPEC2015 “XXIX International Conference of photonic, electronic and atomic collisions” (*Interational non-UE congress*), Toledo (Spain), 22nd-28th of July 2015.

- *Imaging the predissociation dynamics of the methyl radical from the $3p_z$ Rydberg state* (Poster), J. Woodhouse, G. Balerdi, R. de Nalda, M.L. Senent, A. García-Vela, and L. Bañares.

2nd APCTP-TUS Workshop on Dark Energy (*Intenational non-UE congress*), Tokyo (Japan), 3rd-5th of August 2015.

- *Gauge Invariant Perturbations and Covariance in Quantum Cosmology* (Invited talk), Laura Castelló Gomar, Mercedes Martín-Benito, and Guillermo A. Mena Marugán.
- *The cosmological constant problem* (Invited talk), Gianluca Calcagni.

Hot Topics in General Relativity and Gravitation (*Intenational non-UE congress*), Qui Nhon (Vietnam), 9th-15th of August 2015.

- *Gauge Invariant Perturbations in Quantum Cosmology* (Plenary talk), Laura Castelló Gomar, Mercedes Martín-Benito, and Guillermo A. Mena Marugán.
- *Mukhanov-Sasaki Equations in Hybrid Loop Quantum Cosmology* (Plenary talk), Laura Castelló Gomar, Mercedes Martín-Benito, and Guillermo A. Mena Marugán.

XXIV International fall workshop in geometry and physics, Zaragoza (Spain). (*International UE congress*), Zaragoza (Spain), 1st-4th of September 2015.

- *Hamiltonian dynamics of the parametrized scalar field with boundaries* (Oral), J. Fernando Barbero G., Juan Margalef-Bentabol, and Eduardo J. S. Villaseñor.

International conference on Quantum, Atomic, Molecular and Plasma Physics (QuAMP) (*Intenational non-UE congress*), Sussex (UK), 1st-4th of September 2015.

- *Quantum enhanced magnetometry with cold molecules* (Poster), Jordi Mur.

XXI International School on Nuclear Physics, Neutron Physics and Applications (*UE congress*) Varna (Bulgaria), 6th – 12th of September 2015.

- *Beta-decay properties of neutron-rich medium-mass nuclei* (Invited talk), P. Sarriguren.
- *Structure of exotic Mg isotopes and temperature dependence of the symmetry energy of finite nuclei* (Invited talk), M.K. Gaidarov, P. Sarriguren, A.N. Antonov, D. N. Kadrev, and E. Moya de Guerra.

Einstein on the beach: 1915-2015, 100 años de relatividad general (I Jornadas en corrientes científicas del mundo contemporáneo), Águilas (Murcia), 9th-12th of September 2015.

- *Special Relativity: A short introduction.* (Invited talk), J. Fernando Barbero G.
- *General Relativity: A short introduction.* (Invited talk), J. Fernando Barbero G.

Workshop on Excited-State Quantum Phase Transitions, European Center for Theoretical Studies, Trento (Italy), 21st-25th of September 2015.

- *The Elliptic Gaudin Model* (Invited talk), J. Dukelsky.

XXII Nuclear Physics Workshop ‘Marie and Pierre Curie’ Essential Problems in Nuclear Physics (UE congress), Kazimiers Dolny (Poland), 22nd-27th of September 2015.

- *Ground-state properties and symmetry energy of Mg isotopes with A=20-36* (Oral contribution), M.K. Gaidarov, A.N. Antonov, P. Sarriguren, and E. Moya de Guerra.

Ultrafast Science and Technology Spain 2015 (USTS-2015) (International non-UE congress), Madrid (Spain), 24th-25th of November 2015.

- *Theoretical study of the photodissociation of the methyl radical* (Poster), A.Zanchet, R.de Nalda, M.L.Senent, A.García Vela and L.Bañares.

Encuentro sobre fronteras de la Ciencia, Universidad de Valladolid, 2nd of December 2015.

- *En las fronteras de la física, espacio y tiempo ¿Qué es la relatividad?* (Invited talk), J. Fernando Barbero G.

The Eighth Australasian Conference on General Relativity and Gravitation (ACGRG8) (Intenational non-UE congress), Clayton (Australia), 2nd-4th of December 2015.

- *Gauge Invariant Formalism for Perturbations in Quantum Cosmology* (Oral contribution), Laura Castelló Gomar, Mercedes Martín-Benito, and Guillermo A. Mena Marugán.
- *Mukhanov-Sasaki Equations in Hybrid Loop Quantum Cosmology* (Oral contribution), Laura Castelló Gomar, Mercedes Martín-Benito, and Guillermo A. Mena Marugán.

Second Granada Workshop on Quantum Phase Transitions, University of Granada, 9th-10th of December 2015.

- *Quantum phase transitions in the Elliptic Gaudin Model* (Invited talk), J. Dukelsky.

4.1.2 DPTO. DE ESPECTROSCOPÍA NUCLEAR, VIBRACIONAL Y DE MEDIOS DESORDENADOS / NUCLEAR, VIBRATIONAL AND DISORDERED MEDIA SPECTROSCOPY

ISIS Molecular Spectroscopy Science Meeting 2015 (International non-UE congress), Abingdon (United Kingdom), 29th-30th of January 2015.

- *Towards a better modelisation of carbon-based nanomaterials* (poster), R. Fernández-Perea, C. Cabrillo, S. Mukhopadhyay, F. Fernández-Alonso, and F. J. Bermejo.

VIII Congreso CYTA/CESIA. Conocimientos para impulsar una evolución inteligente del sector alimentario, (National congress), Badajoz (Spain), 8th-10th of April 2015.

- *Formación y propiedades de emulsiones gelificadas en frío* (poster), T. Pintado, F. Jiménez-Colmenero, C. Ruiz-Capillas, P. Carmona, and A. M. Herrero.

Discussions on Nano & Mesoscopic Optics (DINAMO) (International non-UE congress), El Chaltén (Argentina), 8-12th of April 2015.

- *Light emission, scattering and absorption in metal and semiconductor nanowires driven by Fabry-Perot and/or Mie resonant modes* (oral contribution and poster), José A. Sánchez-Gil.

SASc-ISOLDE Spring Workshop on GEANT4 (International UE congress), Bratislava (Slovak Republic), 26th-30th of April 2015.

- *Monte Carlo simulations of optical processes in scintillators with Geant4* (invited talk), E. Nácher

Non-destructive and microanalytical techniques in art and cultural heritage (Techanrt 2015) (International non-UE congress), Catania (Italy), 27th-30th of April 2015.

- *On the fiber” SERS detection of synthetic dyes employing laser photoreduced Ag nanoparticles* (oral contribution), Irene Bonacini, Francesca Gallazzi, M.V. Cañamares, Silvia Prati, Giorgia Scutti, Santiago Sánchez-Cortés, and Rocco Mazzeo.
- *Spectroscopic assessment of the UV laser removal of varnishes on paint substrates* (oral contribution), D. Ciofini, M. Oujja, M.V. Cañamares, S. Siano, and M. Castillejo.
- *29Si and 1H NMR investigation on the interaction between two anti-graffiti coatings and a granite* (poster), P.M. Carmona-Quiroga, M.T. Blanco-Varela, I. Sobrados, and S. Martínez-Ramírez.

- *In-situ Micro-Raman spectroscopic analysis of Handprints in Maltravieso Cave (Cáceres), Spain* (poster), S. Martínez-Ramírez, D. Moreno, A.M. García, J.C. Aguilera, and H. Collado.

International Conference on Electromagnetic Isotope Separators and Related Topics (EMIS 2015), (*International non-UE congress*), Grand Rapids (USA), 11th-15th of May 2015.

- *Characterization of the DTAS detector and first measurements* (poster), V. Guadilla, A. Algora, J.L. Taín, E. Nácher, and J. Wilson.

2nd Joint Workshop CSIC-CNR “Advanced Materials & Structure with Multifunctional Behaviors (International UE congress), Rome (Italy), 8th-9th of June 2015.

- *Ba compounds to prevent sulfate attack in concrete: developing a new repairing material* (poster), S. Gismera-Díez, P.M. Carmona-Quiroga, S. Martínez-Ramírez, and M. T. Blanco-Varela.

Progress in Electromagnetic Research Symposium (PIERS 2015) (*International non-UE congress*), Prague (Czech Republic), 6th-9th of July 2015.

- *Semiconductor nanowires: emitting and receiving nanoantennas* (invited talk), D. R. Abujetas, R. Paniagua-Domínguez, A. D. Van Dam, G. Grzela, J. Gómez Rivas, and José A. Sánchez-Gil.

XXXV Bienal de la Real Sociedad Española de Física. 25th Encuentro Ibérico de Enseñanza de la Física (National congress), Gijon (Spain), 13th-17th of July 2015.

- *Multi-particle emission from ^{31}Ar at IDS* (oral contribution), I. Marroquín, Olof Tengblad, A. Perea.

13th Recent Advances in Concrete Technology and Sustainability Issues (International non-UE congress), Ottawa (Canada), 14th-17th of July 2105.

- *Influence of coal mining by-products on the new blended cement properties* (oral contribution), M. Frías, O. Rodriguez, R. García, R. Vigil, I. Vegas, S. Martínez-Ramirez, L. Fernández-Carrasco, M. I. Sánchez de Rojas.

Re-writing Nuclear Physics textbooks: 30 years of radioactive ion beam physics (International non-UE congress), Pisa (Italy), 20th-24th of July 2015.

- *Single particle versus collectivity, shapes of exotic nuclei* (invited talk), A. Jungclaus.

XXIX International Conference on Photonic, Electronic, and Atomic Collisions (ICPEAC2015) (International non-UE congress), Toledo (Spain), 22th-28th of July 2015.

- *Time and space-resolved spectroscopic and imaging study of a laser-produced swine muscle tissue plasma* (poster), J.J. Camacho, L. Díaz.

VI European Conference on Neutron Scattering (ECNS 2015) (International UE congress), Zaragoza (Spain), 30th of August-4th of September 2015.

- *Real-time Neutron-scattering Studies of Molecular Intercalation in Graphite Oxide* (oral contribution), C. Cabrillo, F. Barroso-Bujans, R. Fernández-Perea, F. Fernández-Alonso, D. Bowron, and F. J. Bermejo.
- *Molecular Deuterion crystallitation under quasi-1D confinement* (poster), C. Cabrillo, R. Fernández-Perea, C. Mondelli, M.A. González, and L. Chico.

XI Reunión Nacional de Óptica (National congress), Salamanca (Spain), 1st-4th of September 2015.

- *Optical spectroscopy of semiconductor nanowires: Tailoring light harvesting and emission at the nanoscale* (oral communication), D. R. Abujetas, R. Paniagua-Domínguez, A. D. Van Dam, J. Gómez Rivas, and José A. Sánchez-Gil.
- *New Approaches in Metal Enhanced Spectroscopies (SERS and SEF): Tailoring the Size and Shape of Silver Nanoparticles with Outstanding Plasmonic Properties* (plenary talk), J.V. García-Ramos, A. García-Leis, and S. Sánchez-Cortés.

XIII Iberian Joint Meeting on Atomic and Molecular Physics (IBER2015) (International UE congress), Aveiro (Portugal), 6th-9th of September 2015.

- *SERS and SEF Nanosensors based on Nanostructured Metal Surfaces: Linkage of plasmonic nanoparticles in colloidal suspensions for enhanced molecular sensing* (Invited talk), J.V. García-Ramos, A. García-Leis, S. Sánchez-Cortés, and P. Sevilla.
- *Emission characteristics and dynamics of species in a TEA-CO₂ laser-produced CaO plasma* (poster), J.J. Camacho, and L. Díaz.
- *Time and space-resolved study of a laser-produced SiO plasma* (poster), L. Díaz, and J.J. Camacho.

16th European Conference on the Spectroscopy of Biological Molecules (ECSBM) (International UE congress), Bochum (Germany), 6th-10th of September 2015.

- Enhanced spectroscopies (SERS and SEF) of non-steroidal and anti-inflammatory drug piroxicam adsorbed on silver nanoparticles (poster), P. Sevilla, M. Hernández, E. Corda, C. Domingo, and J.V. García-Ramos.

XXXIV Mazurian Lakes Conference on Physics (*International non-UE congress*), Piaski (Poland), 6th-13th of September 2015.

- Multi-particle emission from ^{31}Ar at IDS (oral contribution), I. Marroquín.

XVI AGATA Week (*International UE congress*), Valencia (Spain), 22nd-24th of September 2015.

- DSSD Lund (oral contribution), E. Nácher.

Iberic International OSA Network of Students (Ions), (*International non-UE congress*), Valencia (Spain), 22nd-24th of September 2015.

- Spectroscopic Application to Chemical Reactions in Artificial Building Materials (poster), Rocío Gutierrez-Contreras, S. Martínez-Ramírez.

The 14th International Congress on the Chemistry of Cement (*International non-UE congress*), Beijing (China), 13th-16th of October 2015.

- Micro-Raman and Raman Imaging studies of glassy material produced by continuous wave (CW) CO₂ laser irradiation of lime/pozzolan mortar (poster), S. Martínez-Ramírez, L. Díaz, and J.J. Camacho.
- Calorimetric study of white Portland cement hydration. Effect of nanosilica and temperature (poster), I.F. Saez del Bosque, S. Martínez-Ramírez, and M.T. Blanco-Varela.
- C-S-H gels in blended cements: Study by infrared spectroscopy (poster), D. Torrens-Martin, L. Fernández-Carrasco, and S. Martínez-Ramírez.
- Developing new sulfate-resistant cements: a BaCO₃ approach (poster), P.M. Carmona-Quiroga, S. Gismera-Diez, S. Martínez-Ramírez, N. Husillos, M. T. Blanco-Varela.
- Influence of Ca/Si ratio on the microstructure and properties of blended cements elaborated with kaolinite based waste (poster), M. Frías, S. Martínez-Ramírez, O. Rodríguez, R. García, R. Vigil del Villar, I. Vegas, E. Lahoz.
- Effect of activation temperature on mineralogy and reaction kinetics in activated waste/Ca(OH)₂ systems (poster), R. Vigil del Villar, R. García, R. Ramírez, R. Rubio, Moisés Frias, O. Rodríguez, S. Martínez-Ramírez, L. J. Fernández-Carrasco, and I. Vegas.

Estudio y Conservación del Patrimonio Cultural 2015 (ECPC 2015) (*National congress*), Málaga (Spain), 16th-19th of November 2015.

- Eliminación láser de barnices envejecidos sobre pinturas artísticas: efecto de longitud de onda (oral contribution), D. Ciofini, M. Oujja, M.V. Cañamares, S. Siano, and M. Castillejo.
- Estudio del efecto de la limpieza láser en plata sulfurada (oral contribution), T. Palomar, M. Oujja, I. Llorente, B. Ramírez Bara, M.V. Cañamares, M. Castillejo, and E. Cano.
- Evaluación de la eliminación láser de líquenes sobre el patrimonio construido (oral contribution), M. Castillejo, M. Oujja, M. Sanz, C. Ascaso, A. de los Ríos, S. Pérez-Ortega, V. Souza-Egipsy, J. Wierzchos, M. Speranza, and M.V. Cañamares.

8th International Conference of Education, Research and Innovation (ICERI2015) (*International non-UE congress*), Sevilla (Spain), 16th-18th of November 2015.

- Students behavior versus e-learning activities (poster) B. López, C. Rueda, C. Sainz, M. Sánchez-Paniagua, and P. Sevilla.
- Impact of the activities through virtual platforms on the learning-teaching success in Pharmacy Degree Students (poster), B. López, C. Rueda, C. Sainz, M. Sánchez-Paniagua, and P. Sevilla.

IV Encontro Brasileiro de Espectroscopia Raman (IVEnBraER) (*National Congress*), Juiz de Fora (Brazil), 6th - 9th of December 2015.

- Surface-Enhanced Raman Scattering (SERS): Strategies in Highly Sensitive Molecular Detection and Bioanalysis (plenary lecture), S. Sánchez-Cortés.

4.1.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS

ECONOS 2015 (*International non-EU*), Leuven (Belgium), 12th-15th of April 2015.

- Experimental determination of V-V collisional relaxation rates in N₂ between 77 and 300 K by double resonance stimulated Raman spectroscopy (Poster), Dionisio Bermejo and Raúl Martínez.

European Geosciences Union General Assembly 2015 (*International*) Vienna (Austria), 12th-17th of April 2015

- *Metastable NAT in Ice-Clouds* (Poster), F. Weiss, F. Kubel, O. Gálvez, M. Hoelzel, S. F. Parker, R. Iannarelli, M. J. Rossi, and H. Grothe.

AMOC 2015: Anharmonicity in medium-sized molecules and clusters (*International non-EU congress*), Madrid (Spain), 26th-30th of April 2015.

- *High resolution infrared spectroscopy of molecular ions of astrophysical interest* (Invited Lecture), J. L. Doménech, M. Cueto, V. J. Herrero, I. Tanarro, and J. Cernicharo
- *Production and kinetics of molecular ions of astrophysical interest* (Poster), M. Jiménez-Redondo, M. Cueto, J. L. Doménech, V. J. Herrero, and I. Tanarro.
- *Vibrational harmonic and anharmonic study of neutral glycine: Experiment versus Gaussian-type orbitals and plane wave ab initio DFT* (Poster), V. Timón, and O. Gálvez
- *Raman spectroscopy and inelastic collisions of cold molecules* (Invited lecture), J. M. Fernández, G. Tejeda, E. Moreno, F. Gámez, E. Carmona-Novillo, M. I. Hernández, and S. Montero.

15th Symposium on Molecular Spectroscopy Japan (*International non-EU congress*), Kyushu University, Fukuoka (Japan), 22nd-23rd of May 2015.

- *CO/H₂O mixtures: computer simulations and prediction of IR spectra* (Oral presentation), Rafael Escribano, Naoki Watanabe, Tetsuya Hama and Akira Kouchi.

COST Action Our Astrochemical History CM1401 (*International non-EU congress*), Prague (Czech Republic), 25th-29th of May 2015.

- *Diagnostics and modeling of cold laboratory plasmas with high hydrogen content; applications to molecular astrophysics* (Poster), Isabel Tanarro, Maite Cueto, Miguel Jiménez-Redondo, Víctor J. Herrero, José L. Doménech, and José Cernicharo.

Xth International Conference on Quantum Fluid Clusters QFC2015 (*International non-EU congress*), Toulouse (France), 7th-11th of June 2015.

- *Crystallization of Undercooled Quantum Liquids: para-H₂, ortho-D₂, and their mixtures with Ne* (Oral contribution), J. M. Fernández, M. Kühnel, G. Tejeda, E. Moreno, A. Kalinin, R. E. Grisenti, and S. Montero.

IV Reunión sobre Ciencias Planetarias y Exploración del Sistema Solar (CPESS4) (*National*), Alicante (Spain), 8th-10th of Junio, 2015.

- *Estudio de la adsorción de glicina en carbono amorfo hidrogenado (HAC)* (Oral Presentation), V. Timón, R. Escribano, O. Gálvez, B. Maté, V. Herrero e I. Tanarro.
- *Physical properties and predicted spectra of CH₄/CO₂ ice mixtures* (Poster), M.A. Moreno, R. Escribano, R. Luna and M.A. Satorre.

ISPC 2015 - 22nd International Symposium on Plasma Chemistry (*International*), Antwerp (Belgium), 5th-10th of July 2015.

- *Processing of plasma deposited analogues of interstellar carbonaceous dust by UV irradiation, electron bombardment and plasma exposure* (Poster), M. Jiménez-Redondo, B. Maté, I. Tanarro, M. A. Moreno, R. Escribano, and V. J. Herrero.

International Symposium on Molecular Spectroscopy, 70th Meeting (*International non-UE congress*), Champaign-Urbana, Illinois, USA 22nd-26th of June 2015.

- *Stability of glycine to energetic processing under astrophysical conditions investigated via infrared spectroscopy* (Oral presentation), Belén Maté, Víctor J. Herrero, Isabel Tanarro, and Rafael Escribano.
- *New accurate wavenumbers of H³⁵Cl⁺ and H³⁷Cl⁺ rovibrational transitions in the v=0-1 band of the 2Π state* (Oral presentation), J. L. Doménech, M. Cueto, V. J. Herrero, I. Tanarro, and J. Cernicharo.
- *Investigation of carbonaceous interstellar dust analogues by infrared spectroscopy: effects of energetic processing* (Oral presentation), Belén Maté, M. Jiménez-Redondo, I. Tanarro, and V. J. Herrero.

XXVI International Symposium on Molecular Beams (*International non-EU congress*), Segovia (Spain), 28th of June-3rd of July 2015.

- *Survival of glycine to high energy radiation in astronomical environments investigated with 2 keV electron bombardment* (Poster), B. Maté, I. Tanarro, R. Escribano, M. A. Moreno and V. J. Herrero.
- *Effect of vibrational excitation on the reactivity of D+MuH(v=1)* (Poster), V. Sáez-Rábanos, J. E. Verdasco, V. J. Herrero, J. Aldegunde, P. G. Jambrina, and F. J. Aoiz.
- *Dynamics of the Hg + Br₂ reaction. Abstraction vs collision induced dissociation mechanisms* (Poster), P.G. Jambrina, M. Menéndez, V.J. Herrero, and F.J. Aoiz.
- *Broadening of H₂O rotational lines by collisions with He atoms at low temperature* (Oral Contribution), M. I. Hernández, J. M. Fernández, and S. Montero.

- *Experiments on undercooled liquid microjets of H₂, D₂ and their mixtures with Ne* (Invited lecture), J. M. Fernández, M. Kühnel, G. Tejeda, E. Moreno, A. Kalinin, R. E. Grisenti, and S. Montero.

ISPC 2015 - 22nd International Symposium on Plasma Chemistry (*International*), Antwerp (Belgium), 5th-10th of July 2015.

- *Processing of plasma deposited analogues of interstellar carbonaceous dust by UV irradiation, electron bombardment and plasma exposure* (Poster), M. Jiménez-Redondo, B. Maté, I. Tanarro, M. A. Moreno, R. Escribano, and V. J. Herrero.

27th International Laser Radar Conference (*International non-UE congress*), New York (USA), 5th-10th of July 2015.

- *Polarimetric-Lidar Raman for tropospheric ice, liquid and water vapor content. Instrument concept and design* (Extended Abstract, Poster), G. Javier Fochesatto, Óscar Galvez, Rafael Escribano, Miguel A. Moreno, and Pablo Ristori.

8th INTERNATIONAL Conference on Advanced Vibrational Spectroscopy (*International non-EU congress*), Viena (Austria), 12th-17th of July 2015

- *Studies on the photolysis of iodate salts.* (Invited talk), O. Gálvez and A. Saiz-López.

XXXV Reunión Bienal de la Real Sociedad Española de Física (*National*), Gijón (Spain), 13th-17th of July 2015.

- *Diagnóstico y modelado de plasmas fríos de mezclas de H₂+N₂ y H₂+O₂* (Oral Presentation), M. Jiménez-Redondo, I. Tanarro, V. J. Herrero.
- *Procesado de análogos de polvo carbonáceo interestelar depositados por plasma mediante irradiación UV, bombardeo con electrones y exposición a plasma* (Poster) M. Jiménez-Redondo, B. Maté, I. Tanarro, V. J. Herrero.
- *Espectroscopía infrarroja de alta resolución de iones de interés astrofísico producidos en plasmas fríos moleculares* (Poster) M. Cueto, J. L. Doménech, V. J. Herrero, J. Cernicharo, I. Tanarro.

ISACC- 2015 International Symposium "Atomic Cluster Collisions" (*International non-EU congress*), Madrid (Spain), 18th-21st of July 2015.

- *Bombardment of solid glycine by 2 keV electrons: Implications for astronomical environments* (Invited lecture), V. J. Herrero, B. Maté, I. Tanarro, R. Escribano, and M. A. Moreno.

The 24th Colloquium on High Resolution Molecular Spectroscopy (HRMS 2015) (*International non-EU congress*). Dijon (France), 24th-28th August 2015.

- *High-resolution stimulated Raman spectroscopy and analysis of v2 and v3 bands of ¹³C₂H₄ using the D2h top data system* (Poster), A. Alkadrou, M. Rotger, D. Bermejo and V. Boudon.
- *New Accurate Wavenumbers of H³⁵Cl⁺ and H³⁷Cl⁺ Rovibrational Transitions in the v=1-0 Band of the ²P State* (Poster) J. L. Doménech, M. Cueto, J. Cernicharo, V. J. Herrero, I. Tanarro, and B. Drouin.

XI Reunión Nacional de Óptica (*National*), Salamanca (España), 1st-4th of September 2015.

- *Mid infrared optical constants and porosity of H₂O: CH₄ ices at 30 K.* (Poster), Belén Maté, Coen Fransen, Juan Ortigoso, Sergio Pilling, and Jean-Baptiste Bossa.

IBER 2015 (*International*), Aveiro (Portugal), 6th-9th of September 2015.

- *Laboratory analogs of interstellar carbonaceous dust: plasma deposition and energetic processing* (Poster), B. Maté, I. Tanarro, M. Jiménez-Redondo, M. A. Moreno, R. Escribano and V. J. Herrero.
- *Distinct influence of vibration on the two channels of the D+MuH(v=1) reaction* (Oral Presentation), V. Sáez-Rábanos, J. E. Verdasco, V. J. Herrero, J. Aldegunde, P. G. Jambrina, and F. J. Aoiz.

4.1.4 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

2015 EMN MEETING on Polymer (*International non-UE congress*), Orlando, FL (USA) 7th-10th of January 2015.

- *Competition between phase separation and structure confinement in all polymer heterojunctions: Influence on charge transpor* (Invited talk), Mari Cruz García-Gutiérrez, A. Rodríguez-Rodríguez, M. Soccio, D.E. Martínez-Tong, and T.A. Ezquerra.

APS March Meeting 2015 (*International non-UE congress*), San Antonio(USA) 2nd-6th of March 2015.

- *Improving information density in ferroelectric polymer films by using nanoimprinted gratings* (Oral), Daniel E. Martínez-Tong, Michela Soccio, Daniel R. Rueda, Aurora Nogales, Mari Cruz García-Gutiérrez, and Tiberio Ezquerra.

BoHMena'15 Beacons of Hope in the Quest for the Next Einstein in the MENA region (International non-UE congress) Fez (Morocco) 3rd-6th of March 2015.

- *Hardness study of polymer surfaces: non-destructive characterization of biomaterials* (Invited talk), Francisco J. Baltá-Calleja.

Fourth International Conference on Multifunctional, Hybrid and Nanomaterials (International congress) Sitges, Barcelona, (Spain) 9th-13rd of March 2015.

- *Electrically conductive PTT-block-PTMO/SWCNTs+Graphene Nanoplatelets hybrid nanocomposites prepared by in situ polymerization* (Poster), S.I. Paszkiewicz, Anna Szymczyk, Amelia Linares, Tiberio A. Ezquerra, K. Livanov, X.M. Sui, D.H. Wagner, and Z. Roslaniec.
- *Influence of hybrid nanofillers including MWCNTs and Graphene Nanoplatelets in PTT based nanocomposites prepared by in situ polymerization* (Poster). Sandra I. Paszkiewicz, I. Pawelec, Anna Szymczyk, M. Zenker, R. Pilawka, Amelia Linares, Tiberio A. Ezquerra, and Z. Roslaniec.

E-MRS 2015 Spring Meeting (International non-UE congress), Lille (Francia), 11th-15th of May 2015.

- *Formation and properties characterization of laser induced periodic surface structures on the semiconducting polymer poly(3-hexyl thiophene)* (Oral), Álvaro Rodríguez-Rodríguez, Esther Rebollar, Michelina Soccio, J.V. García-Ramos, T.A. Ezquerra, M. Castillejo, and M.C. García-Gutiérrez.
- *Laser fabrication of polymer ferroelectric nanostructures for non-volatile organic memory devices* (Poster), Daniel E. Martínez-Tong, Álvaro Rodríguez-Rodríguez, Aurora Nogales, Mari Cruz García-Gutiérrez, Tiberio A. Ezquerra, and Esther Rebollar.

VII AUSE Congress and II ALBA User's Meeting - 2015 (National congress), Barcelona (Spain), 16th-19th of June 2015.

- *Nanofabrication of Laser Induced Periodic Surface Structures on polymer thin films as revealed by Grazing Incidence Small Angle X ray Scattering* (Oral), E. Rebollar, D.R. Rueda, I. Martín-Fabiani, A. Rodríguez-Rodríguez, M.C. García-Gutiérrez, G. Portale, M. Castillejo, and T. A. Ezquerra.
- *Semiconducting polymer nanostructures studied by a combination of synchrotron techniques and AFM*. (Poster), A. Rodríguez-Rodríguez, E. Rebollar, M. Soccio, D.R. Rueda, M. Castillejo, T.A. Ezquerra, and M.C. García-Gutiérrez.

European Polymer Congress (International non-UE congress), Dresden (Germany) 21st-26th of June 2015.

- *Molecular dynamics of Poly(propylene 1,4-cyclohexanedicarboxylate) and its copolymers with Poly(neopentyl glycol 1,4-cyclohexanedicarboxylate) as revealed by broadband dielectric spectroscopy* (Poster), L. Genovese, A. Linares, T.A. Ezquerra, A. Nogales, M. Soccio, N. Lottia, and A. Munaria

XI Congreso Nacional de Materiales Compuestos (MATCOMP 15), (National congress), Móstoles, Madrid, (Spain), 6th-8th of July 2015.

- *Un novedoso mecanismo del grafeno como nanorrefuerzo de matrices poliméricas hidrofílicas* (Oral), A. Flores, F. Ania, H. J. Salavagione, G. Martínez, G. Ellis, and M. A. Gómez-Fatou.

International Conference in Laser Ablation – COLA 2015 (International non-UE congress), Cairns, Queensland, Australia, 31st of August-4th of september 2015.

- *In situ monitoring of Laser Induced Periodic Surface Structures formation on polymer films by Grazing Incidence Small Angle X-ray Scattering* (Oral), E. Rebollar, D.R. Rueda, I. Martín-Fabiani, A. Rodríguez-Rodríguez, M.C. García-Gutiérrez, G. Portale, M. Castillejo, and T. A. Ezquerra.
- *Simultaneous laser induced periodic nanostructuring and diffraction-assisted micropatterning of thin polymer films* (Poster), E. Rebollar, J.J. Hernández, D.E. Martínez-Tong, M.C. García-Gutiérrez, T. A. Ezquerra, and M. Castillejo.

6th International Conference on Synchrotron Radiation in Polymer Science (SRPS6) (International non-UE congress), Madrid, (Spain), 7th-10th of September 2015. Chaired by Tiberio A Ezquerra, Mari Cruz García Gutierrez and Aurora Nogales.

- *Relaxation processes in a lower disorder order transition diblock copolymer*. (Poster), A Sanz, TA Ezquerra, R. Hernández, M. Sprung, and A Nogales.
- *Mapping the Structural Order of Laser Induced Periodic Surface Structures in Thin Polymer Films by Microfocus Beam Grazing Incidence Small Angle X-Ray Scattering* (Oral), I. Martín-Fabiani, E. Rebollar, M.C. García-Gutiérrez, D. R. Rueda, M. Castillejo, and T.A. Ezquerra.
- *In situ monitoring of Laser Induced Periodic Surface Structures formation on polymer films by Grazing Incidence Small Angle X-ray Scattering* (Oral), E. Rebollar, D.R. Rueda, I. Martín-Fabiani, A. Rodríguez-Rodríguez, M.C. García-Gutiérrez, G. Portale, M. Castillejo, and T.A. Ezquerra.

- *Crystallinity in Poly(3-Hexyl Thiophene)Nanoparticles* (Poster), Jing Cui, DE Martínez-Tong, T.A Ezquerra, and A Nogales.
- *A characterization of Poly(L-lactic acid) thin films via AFM, ellipsometry and X-ray scattering.* (Poster), D. E. Martínez-Tong, J. Speice, A. Nogales, M. Sferrazza, and S. Napolitano.
- *Properties characterization of laser induced periodic surface structures on the semiconducting poly(3-hexylthiophene)* (Poster), Álvaro Rodríguez Rodríguez, E. Rebollar, M. Soccio, T. A. Ezquerra, D. R. Rueda, J.V. García-Ramos, M. Castillejo, and M.C. García- Gutiérrez.
- *Competition between phase separation and structure confinement in P3HT/PCDTBT heterojunctions: Influence on nanoscale charge transport* (Poster), Álvaro Rodríguez Rodríguez, M. Soccio, D.E. Martínez-Tong, T.A. Ezquerra, B. Watts, and M.C. García-Gutiérrez.
- *Hyper-diffusive dynamics in nanocomposite polymer hydrogels as determined by XPCS.* (Poster), M. Criado, R. Hernández, A. Nogales, M. Sprung, C. Mijangos, and T. Ezquerra.
- *Finite-size effects on the structural behavior of π-conjugated oligomers.* (Poster), J. Martín, R. Li, A. Nogales, D.-M. Smilgies, and N. Stingelin.

1st French-Spanish Joint Congress for Young Researchers in Polymers (*International non-UE congress*), *Donostia - San Sebastián, (Spain)* 14th-18th of September 2015.

- *Piezoelectric Force Microscopy in P(VDF-TrFE) Nanoparticles Embedded in Continuous P3HT Thin Films.* (Oral Presentacion). Jing Cui.

Biophysical-Society Thematic Meeting: Biophysics in the Understanding, Diagnosis, and Treatment of Infectious Diseases (*International non-UE congress*), *Stellenbosch (SouthAfrica)*, 16th-20th of November 2015.

- *Multiscale Simulation to Understand the Bactericidal Action of the AS-48 Antimicrobial Peptide Description* (Poster), Víctor Cruz, Javier Ramos, and Javier Martínez-Salazar.

Ultrafast Science and Technology Spain 2015 (*National*), 24th-25th of November 2015.

- UV and IR femtosecond laser induced periodic surface structuring of polymeric thin films (Poster), E. Rebollar, J.R. Vázquez de Aldana, M. Hernández, T. Ezquerra, P. Moreno, and M. Castillejo.

4.2 ESTANCIAS DE INVESTIGADORES EN EL INSTITUTO / VISITORS

4.2.1 DPTO. DE QUÍMICA Y FÍSICA TEÓRICAS / THEORETICAL PHYSICS AND CHEMISTRY

- ❖ **Dra. Mercedes Martín Benito**, Radboud University, Nijmegen, The Netherlands, 18th-23rd of March 2015.
- ❖ **Prof. Y. Zhao**, Nanyang Technological University, Singapore, 21st May-31st May 2015.
- ❖ **D. Hove**, Aarhus University, Denmark, 1st-4th of June 2015.
- ❖ **Prof. José Pedro Oliveira Mimoso**, Faculdade de Ciências da Universidade de Lisboa, Lisboa, Portugal, 25th-28th of June 2015.
- ❖ **Prof. Shinji Tsujikawa**, TUS, Tokyo, Japan, 13th-23rd of September 2015.
- ❖ **Prof. A.N. Antonov**, Bulgarian Academy of Sciences, Sofia, Bulgaria, 29th November-5th December 2015.
- ❖ **Prof. M.K. Gaidarov**, Bulgarian Academy of Sciences, Sofia, Bulgaria, 29th November-5th December 2015.
- ❖ **Prof. D. N. Kadrev**, Bulgarian Academy of Sciences, Sofia, Bulgaria, 29th November-5th December 2015.

4.2.2 DPTO. DE ESPECTROSCOPÍA NUCLEAR, VIBRACIONAL Y DE MEDIOS DESORDENADOS / NUCLEAR, VIBRATIONAL AND DISORDERED MEDIA SPECTROSCOPY

- ❖ **D. Rafael Rubira**, Master student, “Estatal Paulista” University, Presidente Prudente, Brazil, 11th of March–12th of September 2015.
- ❖ **Dña. Francesca Gallazzi**, Master student, University of Bologna, Ravenna, Italy. 1st of January–31st of March 2015.
- ❖ **Prof. Pavol Miskovsky**, Full Professor, “P. J. Safarik of Kosice” University, Slovak Republic, 15th of March–1st of April, 15th–20th of November 2015.
- ❖ **Dr. Gabriela Fabriciova**, Assistant Professor, “P. J. Safarik of Kosice” University, Slovak Republic, 10th–17th of April, 25th of September–26th of October 2015.
- ❖ **Dr. Belén Hernández**, Associated Professor, “Paris XIII” University, Paris, France, 13th–17th of April, 13th – 15th of July, 14th–17th of October 2015.
- ❖ **Dña. Maria Sole Zalaffi**, Master student, University of Bologna, Ravenna, Italy. 1st of May–30th of October.

- ❖ **Dr. Daniel Jancura**, Associated Professor, “P. J. Safarik of Kosice” University, Slovak Republic, 4th–29th of June, 16th–22th of November 2015.
- ❖ **Dr. Zuzana Jurasekova**, Assistant Professor, “P. J. Safarik of Kosice” University, Slovak Republic, 8th of June–29th of July 2015.
- ❖ **Gergely Brano**, Associated Professor, “P. J. Safarik of Kosice” University, Slovak Republic, 15th–26th of June 2015.
- ❖ **Prof. Valter Sergo**, Full Professor, Universitá di Trieste, Italy, 19th of June 2015.
- ❖ **Prof. Jaime Gómez Rivas**, FOM-Institute AMOLF, Philips Research Labs, Eindhoven, The Netherlands, 15th–18th of September 2015.
- ❖ **Prof. Mahmoud Ghomi**, Full Professor, “Paris XIII” University, Paris, France, 14th– 7th of October 2015.
- ❖ **Silvia della Marta**, Predoctoral student, Universitá di Trieste, Italy, 1st of November – 31st of December 2015.

4.3 CONFERENCIAS DE INVESTIGADORES INVITADOS / INVITED RESEARCHERS CONFERENCES

4.3.1 DPTO. DE QUÍMICA Y FÍSICA TEÓRICAS / THEORETICAL PHYSICS AND CHEMISTRY

“De Madrid al Cosmos”—Joint Seminar with Universidad Complutense

Prof. Thiago Pereira.

Universidade Estadual de Londrina (Brazil).

CMB: Beyond the Standard Statistical Scenario.

9th of January 2015.

Dr. Diego Rubiera-García.

Fudan University, Shanghai (China).

A Bridge between the Microscopic Structure of Space-Time and Effective Geometries: The Crystal Lessons.
10th of February 2015.

Prof. Ilya L. Shapiro.

Universidade Federal de Juiz de Fora (Brazil).

Anomaly-Induced Effective Action and Starobinsky Model of Inflation.
24th of February 2015.

Dr. Alberto Cortijo.

Instituto de Ciencia de Materiales de Madrid, CSIC.

Graphene: Dirac Fermions in Curved Spaces.

13th of March 2015.

Dr. Diego Sáez-Gómez.

Universidade de Lisboa (Portugal) and ACGC - U. of Cape Town (South Africa).

Modifying General Relativity: Is It Worth?

5th of May 2015.

D^a. Ana Alonso Serrano.

Instituto de Física Fundamental, CSIC, Madrid.

Quantum Cosmology: Games without Frontiers.

12th of May 2015.

Dr. Miguel Zumalacárregui.

ITP Heidelberg (Germany) – Nordita (Sweden).

Non-Linear Evolution of the BAO Scale in Alternative Theories of Gravity.

27th of May 2015.

Dra. Prado Martín Moruno.

Universidad Complutense de Madrid.

*"The Magnificent Seven and Friends": Horndeski Theories Self-Tuning to de Sitter.*9th of June 2015.**Dr. Sam Young.**

Dept. of Physics and Astronomy, University of Sussex (UK).

*Constraining the Early Universe with Primordial Black Holes.*23rd of June 2015.**Prof. Matt Visser.**

Victoria University of Wellington (New Zealand).

*Sparsity of the Hawking Flux.*7th of July 2015.**Prof. Shinji Tsujikawa.**

Tokyo University of Science, Tokyo (Japan).

*Effective Field Theory Approach to Modified Gravity with Applications to Inflation and Dark Energy.*22nd of September 2015.**D. José Manuel Sánchez Velázquez.**

Universidad Complutense de Madrid. JAE Intro, IEM-CSIC.

*Sistema de dos niveles en las cercanías de un agujero negro de Schwarzschild.*19th of October 2015.**Dra. Catarina Bastos.**

Instituto Superior Técnico (IST), Lisbon (Portugal).

*Phase Space Noncommutativity: From Gravity to Quantum Mechanics.*16th of November 2015.**International Loop Quantum Gravity Seminar---Phone seminar, joint with 20 international institutions.****Dr. Andrea Dapor.**

Warszaw University (Poland).

*Rainbows from Quantum Gravity.*27th of January 2015.**Prof. Alejandro Pérez.**

Centre de Physique Théorique, Marseille (France).

*No Firewalls in Quantum Gravity .*10th of February 2015.**Dr. Steffen Gielen.**

Imperial College, London (UK).

*Cosmology with Group Field Theory Condensates.*24th of February 2015.**Dr. Muxin Han.**

Florida Atlantic University, Boca Raton (USA) .

*Quantum Curves.*10th of March 2015.**Dr. Matteo Smerlak.**

Perimeter Institute, Waterloo (Canada).

*Information Loss.*24th of March 2015.**Prof. Jorge Pullin.**

Louisiana State University, Baton Rouge (USA).

*Backreaction of the Hawking Radiation on a Quantum Space-Time.*7th of April 2015.

Dr. Lorenzo Sindoni.

Albert Einstein Institute, Golm (Germany).
Generalized GFT Condensates and Cosmology.
 5th of May 2015.

Dr. Benjamin Bahr.

DESY (Germany).
Numerical Investigations of the EPRL Model.
 1st of September 2015.

Prof. Bianca Dittrich.

Perimeter Institute, Waterloo (Canada).
3D Holography.
 15th of September 2015.

Dr. Eugenio Bianchi.

Penn State, State College (USA).
Squeezed Spin-Networks and Entanglement.
 29th of September 2015.

Dr. Ivan Agulló.

Louisiana State University, Baton Rouge (USA).
Loop Quantum Cosmology, Non-Gaussianity, and CMB Anomalies.
 13th of October 2015.

Dr. Eyo E. Ita.

US Naval Academy (USA).
Intrinsic Time in Quantum Geometrodynamics.
 27th of October 2015.

Dr. Jędrzej Świeżewski.

Warszaw University (Poland).
Developments on the Radial Gauge.
 10th of November 2015.

Dr. Mehdi Assanioussi.

Warszaw University (Poland).
On Deparametrized Models in LQG.
 24th of November 2015.

Dr. Norbert Bodendorfer.

Warszaw University (Poland).
Quantum Symmetry Reductions Based on Classical Gauge Fixings.
 8th of December 2015.

4.3.2 DPTO. DE ESPECTROSCÓPIA NUCLEAR, VIBRACIONAL Y DE MEDIOS DESORDENADOS / NUCLEAR, VIBRATIONAL AND DISORDERED MEDIA SPECTROSCOPY

Prof. Valter Sergio.

Università di Trieste (Italy).
Biomedical applications of Raman spectroscopy: from nanoparticles as sensors to the screening of cancer to the comparison with histology.
 19th of June 2015.

4.4 VISITAS DE INVESTIGADORES A CENTROS INTERNACIONALES / VISITS TO FOREIGN INSTITUTIONS

(De una semana o más / Longer than a week)

4.4.1 DPTO. DE QUÍMICA Y FÍSICA TEÓRICAS / THEORETICAL PHYSICS AND CHEMISTRY

Guillermo Antonio Mena Marugán.

- Tokyo University of Science, Japan, 23rd of July-6th of August 2015.

María Luisa Senent Díez.

- University Paris-Est, Marne la Vallée, France, 14th-25th of January 2015.
- University Paris-Est, Marne la Vallée, France, 9th-20th of March 2015.

Rafael Alejandro Molina Fernández.

- Zuse Institut, Berlin, Germany, 23rd of February-27th of February 2015.
- Nanyang Technological University, Singapore, 23rd of April-4th of May 2015.

Gianluca Calcagni.

- Tokyo University of Science, Japan, March 2015 (one week) and July-August 2015 (two weeks).
- Padua University, Italy, December 2014-February 2015 (nine weeks).

Jordi Mur Petit.

- Zuse Institut, Berlin, Germany, 23rd of February-28th of February 2015.

Luis J. Garay Elizondo.

- Institute for Quantum Computing, Waterloo, Canada, 8th of May-8th of June 2015.

Óscar Moreno Díaz.

- Leave of absence at the Laboratory for Nuclear Science and Center for Theoretical Physics, Massachusetts Institute of Technology (M.I.T.), Cambridge (MA), USA, January-October 2015.

4.4.2 DPTO. DE ESPECTROSCOPÍA NUCLEAR, VIBRACIONAL Y DE MEDIOS DESORDENADOS / NUCLEAR, VIBRATIONAL AND DISORDERED MEDIA SPECTROSCOPY

Santiago Sánchez Cortés.

- Faculty of Sciences, Università degli Studi di Firenze, Italy, 21st-27th of February 2015.
- Department of Biophysics, University P. J. Safarik of Kosice, Slovak Republic, 31st July- 28th August 2015.
- Dipartimento di Scienze Agrarie, Università degli Studi di Bologna, Italy, 3rd of September-15th of October 2015.
- Universidade de Juiz de Fora, Brazil, 22nd of November – 12th of December 2015.

Olof Tengblad.

- CERN, ISOLDE, Geneva, Switzerland
1st-25th of May 2015.
12th-30th of June 2015.
12th-25th of October 2015.

Carlos Cabrillo García.

- ISIS Pulsed Neutron & Muon Source, RAL, Didcot, Oxfordshire, U. K., 8th-16th of December 2015.

Andrea Jungclaus.

- TRIUMF, Canada, 27th of July-31st of August 2015.

Ricardo Fernández Perea.

- ISIS Pulsed Neutron & Muon Source, RAL, Didcot, Oxfordshire, U. K., 8th-16th of December 2015.

Alejandro Garzón Camacho.

- ISOLDE, CERN, Geneva, Switzerland, 19th-26th of May 2015.

Irene Marroquín Alonso.

- Aarhus University (Faculty of Science and Technology), Aarhus, Denmark, 16th February-19th May 2015.
- ISOLDE, CERN, Geneva, Switzerland, 20th of July -4th of August 2015.

4.4.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS**Rafael Escribano Torres.**

- Institute of Low Temperature Science, Hokkaido University, Sapporo, Japan, May and June 2015.

José M. Fernández Sánchez.

- Deutsches Elektronen-Synchrotron DESY, Hamburg, Germany, 14th-20th of August 2015.

Vicente Timón Salinero.

- Institut de Planétologie et d'Astrophysique de Grenoble (UMR 5274). Grenoble, France, December 2015.

4.4.4 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS**Álvaro Rodríguez Rodríguez.**

- Technische Universität München, Garching, Germany. 21st of September–23rd of December 2015.

CAPÍTULO 5

LABOR DOCENTE, DIFUSIÓN DE LA CIENCIA Y OTRAS ACTIVIDADES

CHAPTER 5

TEACHING, OUTREACH AND OTHER ACTIVITIES

5.1 DOCENCIA / TEACHING

5.1.1 DPTO. DE QUÍMICA Y FÍSICA TEÓRICAS / THEORETICAL PHYSICS AND CHEMISTRY

Pedro Sarriguren Suquilbide.

- Estructura Nuclear – Máster Interuniversitario en Física Nuclear. (Master) – (National Official) – Universidad Autónoma de Madrid.
23th-26th of November 2015, 12 hours.

Luis J. Garay Elizondo.

- Electrodinámica Clásica, Grado de Física. Ámbito nacional, Universidad Complutense de Madrid.
September 2015-January 2016, 28,5 hours.
- Relatividad general, Máster en Física Teórica. Ámbito nacional, Universidad Complutense de Madrid.
September 2015-January 2016, 22,5 hours.
- Complementos de Geometría Diferencial y Teoría de Grupos en Física, Máster en Física Teórica. Ámbito nacional, Universidad Complutense de Madrid.
January-May 2015, 22 hours.
- Métodos Matemáticos de la Física I Grado de Física. Ámbito nacional, oficial, Universidad Complutense de Madrid.
September 2015- January 2016, 60 hours.

Elvira Moya Valgañón.

- Energía y Medio Ambiente, Grado en Física. Ámbito nacional, oficial, Universidad Complutense de Madrid.
Curso 2014-2015, 3,5 hours.
- Energía Nuclear, Máster en Energía. Ámbito nacional, official. Universidad Complutense de Madrid.
Curso 2015-2016, 43 hours.
- Estructura Nuclear, Máster en Física Nuclear. Ámbito nacional, oficial. Universidad Complutense de Madrid.
Curso 2015-2016, 30 hours.
- Trabajo Fin de Máster (Física Nuclear), Máster en Física Nuclear. Ámbito nacional, oficial. Universidad Complutense de Madrid.
Curso 2015-2016, 12,5 hours.

Juan Margalef Bentabol.

- Álgebra lineal, Grado de Ingeniería Informática, Ámbito nacional, Universidad Carlos III de Madrid.
September 2015-January 2016, 30 hours.

5.1.2 DPTO. DE ESPECTROSCOPIA NUCLEAR, VIBRACIONAL Y DE MEDIOS DESORDENADOS / NUCLEAR, VIBRATIONAL AND DISORDERED MEDIA SPECTROSCOPY

Santiago Sánchez Cortés.

- Raman Spectroscopy on Surfaces –Master Course (National Official) –Universidade de Juiz de Fora, Brazil.
25th of November – 4th of December 2015, 25 hours.

Olof Tengblad.

- Técnicas Experimentales en Física Nuclear – Master Interuniversitario de Física Nuclear (National Official) – Universidad de Sevilla.
12th-16th of January 2015, 3 hours.

Mª José García Borge.

- Técnicas Experimentales en Física Nuclear – Master Interuniversitario de Física Nuclear (National Official) – Universidad de Sevilla.
12th-16th of January 2015, 1 hour.

Andrea Jungclaus.

- Técnicas Experimentales en Física Nuclear – Master Interuniversitario de Física Nuclear (National Official) – Universidad de Sevilla.
12th-16th of January 2015, 2 hours.

Sagrario Martínez Ramírez.

- Química del Cemento “Tomás Vázquez” – Curso de Postgrado del CSIC (Internacional) – CSIC_IECA, Instituto de Ciencias de la Construcción “Eduardo Torroja”, Madrid.
- 4th-13th of February 2015, 4 hours.**

Marina Molina Santos.

- Química (Teoría y Prácticas y Trabajo Fin de Grado), Grado en Óptica y Optometría. Ámbito nacional, oficial. Universidad Complutense de Madrid.
- Curso 2015-2016, 167,5 hours.**

Paz Sevilla Sierra.

- Físicoquímica Farmacéutica, 2º Grado Farmacia (Teoría y Práctica). Ámbito nacional, oficial. Universidad Complutense de Madrid.

August-December 2015, 155 hours.

- Física Aplicada a Farmacia, 1º Grado Farmacia. Ámbito nacional, oficial. Universidad Complutense de Madrid.

16th-20th of October 2015, 3 hours.

- Resonancia Magnética Nuclear, Ultrasonidos e Imagen Molecular, Máster Universitario en Física Biomédica. Ámbito nacional, oficial. Universidad Complutense de Madrid.

25th of May-4th of June 2015, 6 hours.**Enrique Nácher González.**

- Técnicas Experimentales en Física Nuclear (Prácticas de Laboratorio) – Master Interuniversitario de Física Nuclear (National Official) – Universidad de Sevilla.

12th-16th of January 2015, 12 hours.

- Experimental Techniques in Plasma, Nuclear Physics and Materials – European Master of Science in Nuclear Fusion and Engineering Physics (International) – Universidad Carlos III de Madrid.

2nd-17th of March 2015, 10 hours.**Alejandro Garzón Camacho.**

- Técnicas Experimentales en Física Nuclear (Prácticas de Laboratorio) – Master Interuniversitario de Física Nuclear (National Official) – Universidad de Sevilla.

12th-16th of January 2015, 18 hours.**Irene Marroquín Alonso.**

- Técnicas Experimentales en Física Nuclear (Prácticas de Laboratorio) – Master Interuniversitario de Física Nuclear (National Official) – Universidad de Sevilla.

12th-16th of January 2015, 19 hours.**5.1.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS****Óscar Gálvez González.**

- Laboratorio de Químicas – Grado en Ciencias Físicas (National Official) – Facultad de Ciencias Químicas – Universidad Complutense de Madrid.

19th of October-15 of December 2015 – 14 hours.**5.1.4 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS****Víctor L. Cruz Cañas.**

- Biología Estructural Computacional dentro del itinerario de Biotecnología Computacional del Grado de Biotecnología- ETSI Agrónomos - Universidad Politécnica de Madrid.

30th of April 2015, 2 hours.

Araceli Flores Aguilar-Amat.

- Experimental testing for mechanical characterization –Master International Oficial - Ingeniería de Materiales, ETSI Caminos, Canales y Puertos, UPM.
24th of November 2015, 2 hours.

Juan Francisco Vega Borrego.

- Experimentos, teorías y simulación por ordenador aplicados a la reología de poliolefinas". Máster en Alta Especialización en Plásticos y Cauchos, Universidad Internacional Menéndez Pelayo-Consejo Superior de Investigaciones Científicas.
25th of March 2015, 2 hours.

Carmen Arribas Arribas.

- Química, Grado de Ingeniería Aeroespacia. Ámbito nacional, oficial. Universidad Politécnica de Madrid.
Curso 2015-2016, 94,5 hours.
- Ciencia de los Materiales, Grado de Ingeniería Aeroespacia. Ámbito nacional, oficial. Universidad Politécnica de Madrid.
Curso 2015-2016, 67.5 hours.
- Materiales Constituyentes: fibras, matrices, adhesivos y núcleos (Módulo 1), Máster de Materiales Compuestos. Ámbito nacional, oficial. Universidad Politécnica de Madrid.
5th of October 2015, 8 hours.

5.2 CURSOS, CONFERENCIAS Y SEMINARIOS / COURSES, CONFERENCES AND SEMINARS

5.2.1 DPTO. DE QUÍMICA Y FÍSICA TEÓRICAS / THEORETICAL PHYSICS AND CHEMISTRY

Jorge Dukelsky Bercovich.

- *Exactly solvable models in mesoscopic physics*, University of Cambridge, UK, February 2015.

José González Carmona.

- *El grafeno como teoría de fermiones relativistas en dos dimensiones*, talk in the "XII Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia", Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 26th of March 2015.
- *Aplicaciones del grafeno en física fundamental. Renormalización, campos gauge y curvatura con fermiones de Dirac sin masa en dos dimensiones*, Facultad de C.C. Físicas, Universidad Complutense de Madrid, 2th of November 2015.

Jesús Fernando Barbero González.

- *Separability and Quantum Mechanics*. International Loop Quantum Gravity Seminar 21st of April 2015.
- *Luz y Relatividad. Einstein: la luz, el espacio-tiempo y los quanta*, talk delivered in the series ¿Qué es la luz? Historia de las concepciones científicas sobre la luz, Museo Nacional de Ciencia y Tecnología, 21st of May 2015.
- *Las relatividades de Einstein: una introducción*, Fundación Caja Murcia, Murcia, 25th of May 2015.

Guillermo A. Mena Marugán.

- *Holography and the Dirac Large Number Hypothesis*, Facultad de C.C. Físicas, Universidad Complutense de Madrid, 13th of May 2015.

Rafael Alejandro Molina Fernández.

- *Chiral bounded states in the continuum*, Seminarios del Instituto Gregorio Millán, Universidad Carlos III de Madrid, 10th of December 2015.

Gianluca Calcagni.

- *Cosmological constant*, University of Nagoya, Japan, 21st of July 2015.
- *The cosmological constant problem in quantum gravity*, Mini-workshop on Quantum Gravity and Condensates, 9th of September 2015.

Jordi Mur Petit.

- *Quantum sensing electric fields with trapped ions*, Northwestern University, Evanston (IL), USA, 26th of March 2015.
- *Measuring cold molecules the quantum way*, University of British Columbia, Vancouver, Canada, 7th of April 2015.

Luis J. Garay Elizondo.

- *Do Stars Die too Long?*, Universidad de Waterloo, Canada, May 2015.

Juan Margalef Bentabol.

- *Embeddings as variables in the Hamiltonian formulation of a field theory*, ULL Mathematical Seminar, La Laguna, Spain, 9th of October 2015.

5.2.2 DPTO. DE ESPECTROSCOPIA NUCLEAR, VIBRACIONAL Y DE MEDIOS DESORDENADOS / NUCLEAR, VIBRATIONAL AND DISORDERED MEDIA SPECTROSCOPY

Santiago Sánchez Cortés.

- *Nanospectroscopy based on Plasmonics: Detection of molecules*, part of the “International Master Monabiophot”, Universidad Complutense de Madrid, Spain, 11th of February 2015.
- *Nanobiospectroscopy: Bioanalysis and Sensitive Molecular Detection*, University of Florence, Italy, 25th of February 2015.
- *Plasmónica: detección molecular intensificada sobre nanoestructuras metálicas*, XII Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia, IEM, Madrid, Spain, 24th of March 2015.
- *Surface-Enhanced Optical Spectroscopy of Biomolecules*, Slovak Academy of Sciences, Kosice, Slovak Republic, 25th of August 2015.
- *Domestication of Light by Spectroscopy/Nanotechnology tandem: a way to know more about the world around us*, Istituto di Studi Avanzati (ISA), Bologna, Italy, 29th of September 2015.
- *Investigation of Pigments in artworks by Surface-Enhanced Raman Scattering (SERS)*, Microchemistry and Microscopy Art Diagnostic Laboratory, University of Bologna, Ravenna, Italy 7th of October 2015.
- *Surface-Enhanced Optical Spectroscopy: Applications in Molecular Detection and Bioanalysis*, Università di Trieste, Italy, 8th of October 2015.
- *Micro-Raman y Raman intensificado sobre nanoestructuras metálicas aplicado al análisis de pigmentos de interés para el Patrimonio Histórico Artístico*, part of the course on “Forensic Chemistry” in the Universidad Autónoma de Madrid, 11th of November 2015.

José Vicente García Ramos.

- *Espectroscopía SERS: Fundamentos y aplicación como nanosensores*, Universidad Complutense de Madrid, 13th of February 2015.
- *Espectroscopías Ópticas (Raman y Fluorescencia) sobre nanoestructuras metálicas y su aplicación como nanosensores*, Universidad de Málaga, 26th of March 2015.

María José García Borge.

- *El núcleo: cien años de sorpresas y beneficios para la sociedad*, Instituto de Estructura de la Materia, Madrid, 18th of June 2015.

Carlos Cabrillo García.

- *La física de la materia desordenada*, part of the “XII Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia”, IEM, Madrid, 25th of March 2015.

José Antonio Sánchez Gil.

- *Nanofotónica y metamateriales en el IEM*, part of the “XII Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia”, IEM, Madrid, 24th-26th of March 2015.

Mª Vega Cañamares Arribas.

- *Coo-dirección del “XII Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia”*, IEM, Madrid, 24-26th of March 2015.

Sagrario Martínez Ramírez.

- *Técnicas espectroscópicas aplicadas al estudio de los materiales artificiales de construcción del Patrimonio Histórico-Artístico*, XII Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia, IEM, Madrid, 24th of March 2015.

Andrés Illana Sison.

- *Estudios de Núcleos Exóticos: Como producir y estudiar isotopos de interés*, part of the “XII Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia”, IEM, Madrid, 25th of March 2015.
- *Etapas en la investigación en Física Nuclear Experimental*, part of the “XII Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia”, IEM, Madrid, 25th of March 2015.

5.2.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS**Víctor Herrero Ruiz de Loizaga.**

- *Cold plasmas in laboratory astrochemistry: Ions and carbonaceous dust analogues*, Colloquium SFB 956, “Conditions and Impact of Star Formation”. Víctor J. Herrero, Isabel Tanarro, José Luis Doménech, Belén Maté, Maite Cueto, Miguel Jiménez-Redondo, Esther Carrasco, José Cernicharo, Universität zu Köln, Alemania, 18th of May 2015.

José Luis Doménech Martínez.

- *Espectroscopia láser de iones de interés astrofísico*. “XII Curso de iniciación a la investigación en estructura de la materia: de las partículas elementales a los sistemas de alto peso molecular”, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, Madrid, Spain, 25th of March 2015.

Isabel Tanarro Onrubia.

- *Plasmas a baja temperatura*, part of the “XII Curso de iniciación a la investigación en estructura de la materia: de las partículas elementales a los sistemas de alto peso molecular”, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, Madrid, Spain, 25th of April 2015.
- *Guided visit to the Laboratorio de Plasmas Fríos*, part of the “XII Curso de iniciación a la investigación en estructura de la materia: de las partículas elementales a los sistemas de alto peso molecular”, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, Madrid, Spain, 25th of April 2015.

José M. Fernández Sánchez.

- *Inelastic Collisions of small Molecules at Low Temperature from Raman Spectroscopy Experiments*, Instituto de Física Fundamental CSIC, Madrid, Spain, 4th of March 2015.

Belén Maté Naya.

- *Hielos astrofísicos*, Instituto de Estructura de la Materia, part of the “XII Curso de iniciación a la investigación en estructura de la materia: de las partículas elementales a los sistemas de alto peso molecular”, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, Madrid, Spain, 25th of April 2015.
- *Stability of extraterrestrial glycine under energetic particle radiation estimated from 2 keV electron bombardment experiments*. 26th-30th of April de 2015. Sackler Laboratory for Astrophysics, Leiden Observatory, the Netherlands.

Guzmán Tejeda Gala.

- *Microjets: Fluidos fuera del equilibrio*, part of the “XII Curso de Iniciación a la Investigacion en Estructura de la Materia”, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, Madrid, Spain, 25th of March 2015.

Vicente Timón Salinero.

- *Infrared Spectroscopy data of ices, solids and molecules with astrophysical implication: an experimental and theoretical work*, Institut de Planétologie et d’Astrophysique de Grenoble, France, 4th of December 2015.
- *Modelización ab initio de adsorción de gases de efecto invernadero en zeolitas (ZIF'S) y peculiaridades en sus espectros infrarrojos*. Instituto de Estructura de la Materia CSIC, Madrid, Spain, 5th of May 2015.
- *Coordinación “XII Curso de Iniciación a la Investigacion en Estructura de la Materia”*, CSIC, Madrid, Spain, 24th-26th of March 2015.

Óscar Gálvez González.

- *Estudios de laboratorio aplicados a la Química Atmosférica*, part of the “Espectroscopía láser de alta resolución en moléculas ligeras Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, Madrid, Spain, 25th of April 2015.

Raúl Z. Martínez Torres.

- *Espectroscopía láser de alta resolución en moléculas ligeras*. XII Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia”, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, Madrid, Spain, 26th of March 2015.

5.2.4 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS**Tiberio Ezquerro Sanz, Mari Cruz García Gutiérrez, Aurora Nogales Ruiz.**

- Organización (“Chairs”) del congreso internacional 6th Synchrotron Radiation in Polymer Science (SRPS), 7th-10th of September 2015, Madrid, Spain.

Tiberio Ezquerro Sanz.

- “*Improving information density in ferroelectric polymer films by using nanostructured surfaces*” Technische Universität München, Physik-Department E13, Lehrstuhl für Funktionelle Materialien, 16th of December 2015.

Jing Cui.

- *Piezoelectric Force Microscopy of ferroelectric nanoparticles embedded in polymer thin films*. XII Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia, IEM/CSIC, Madrid, Spain, 24th of March 2015.

Araceli Flores Aguilar-Amat.

- *Nanoindentación en polímeros*, ETSI Caminos, Canales y Puertos, UPM, Madrid, Spain. Seminarios Internacionales de Fronteras de la Ciencia de Materiales. 9th of March 2015.
- *Nanoindentación en polímeros*, XII Curso de iniciación a la investigación en estructura de la materia, IEM, CSIC, Madrid, Spain, 24th of March 2015.

Javier Ramos Díaz.

- *Structure and viscoelastic properties of short chain branched polyolefins combining hierarchical simulations and experimental data*. Department of Chemistry and Biology, University of Salerno, Italy, 9th of June 2015.
- *Modelización y simulación multiescalar en física*. Seminario del Departamento de Física Macromolecular. IEM-CSIC, 13th of March 2015.

Álvaro Rodríguez Rodríguez.

- *Nanoestructuración de superficies de polímeros semiconductores por técnicas láser*. XII Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia, IEM-CSIC, Madrid, Spain, 24th of March 2015.

Juan Francisco Vega Borrego.

- *Simulación y Experimentos en Física Macromolecular: Polímeros Sintéticos y Biomacromoléculas*. XII Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia, IEM-CSIC, Madrid, Spain, 24th of March 2015.

5.3 PREMIOS Y OTROS MÉRITOS / AWARDS**5.3.1 DPTO. DE QUÍMICA Y FÍSICA TEÓRICAS / THEORETICAL PHYSICS AND CHEMISTRY****José González Carmona.**

- Reviewer of research proposals for the Israel Science Foundation.

Jesús Fernando Barbero González.

- Member of the Scientific Advisory Committee of the International Conference *Loops’15*. Erlangen, Germany.

Eduardo Garrido Bellido.

- Field editor (few-body methods) for the Journal *Few-body Systems*.

Guillermo Antonio Mena Marugán.

- Member of the Scientific Advisory Committee of the International Conference *Loops'15*. Erlangen, Germany.

María Luisa Senent Díez.

- Member of the Management Committee of the COST ACTION 1401 "Our Astrochemical History".
- Member of the Management Committee of the COST ACTION 1405 "MOLIM".
- Member of the Scientific Advisory Committee of the International Conference *AMOC2015*, Madrid (Spain).

Rafael Alejandro Molina Fernández.

- Member of the jury of the Scientific Award SINIF 2015.

Jordi Mur Petit.

- Elected Member of the Board, Societat Catalana de Física.

5.3.2 DPTO. DE ESPECTROSCOPÍA NUCLEAR, VIBRACIONAL Y DE MEDIOS DESORDENADOS / NUCLEAR, VIBRATIONAL AND DISORDERED MEDIA SPECTROSCOPY

José Vicente García Ramos.

- Honor Member of the *Sociedad Española de Óptica*, 1st of September 2015.
- Member of the Scientific Committee of the *IX Conferencia Española de Opto-Electrónica (OPTOEL 2015)*, Salamanca (Spain).

Andrea Jungclaus.

- Member of the Local Organizers in *16th AGATA Week*, Valencia, 22nd-24th September 2015.

José A. Sánchez Gil.

- Member of the Scientific Committee of the *IX Conferencia Española de Opto-Electrónica (OPTOEL 2015)*, Salamanca (Spain).

Sagrario Martínez Ramírez.

- Member of the Technical Committee for *Standardization CTN80: Subcommittee STN05/CTN-80. Limes*.
- Member of the Technical Committee for *Standardization CTN80. Cements and Limes*.

Enrique Nácher González.

- Member of the Local Organizers in *16th AGATA Week*, Valencia, 22nd-24th September 2015.

Diego Romero Abujetas.

- Outstanding Student Contributor, *XI Reunión Nacional de Óptica*, Salamanca (Spain).

5.3.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS

Dionisio Bermejo Plaza.

- Member of the International Advisory Committee of the *International Conference on Spectral Line Shapes*.
- Member of the International Steering Committee of the *European Conference on Non-linear Optics (ECONOS)*.
- Member of the International Advisory Committee of the *Colloquium on High Resolution Molecular Spectroscopy*.
- Adjunct Profesor in the Department of Physics and Astronomy at the *University of Lethbridge*, Lethbridge, Canadá.

Víctor José Herrero Ruiz de Loizaga.

- Member of the board of the *Asociación Española de Vacío y sus aplicaciones (ASEVA)* (Spain).
- Vicepresident of the board of the *Grupo Especializado de Física Atómica y Molecular (GEFAM)* of the *Real Sociedad Española de Física (RSEF)* (Spain).
- Spanish reperesentaive in the *Plasma Science and Technology Division of the International Union for Vacuum Science, Technique and Applications (IUVSTA)*
- Member of the Advisory Comitee of the *13th Iberian Joint Meeting on Atomic and Molecular Physics (IBER2015 Aveiro, Portugal 2015)*.

- Member of the Local Organizing Committee of the *XXVI International Symposium on Molecular Beams (ISMB2015, Segovia, Spain)*.

Salvador Montero Martín.

- Member of the Editorial Board of the Journal of Raman Spectroscopy, Wiley (United Kingdom).

José Luis Doménech Martínez.

- Member of the International Advisory Committee of the *International Symposium on Molecular Spectroscopy*. Until June 2015.

José M. Fernández Sánchez.

- Member of the International Advisory Committee of International Symposium on Rarefied Gas Dynamics.

Isabel Tanarro Onrubia.

- Member of the board of the *Asociación Española de Vacío y sus aplicaciones (ASEVA)* (Spain).
- Member of the board of the "Grupo de Plasmas" of the *Real Sociedad Española de Física* (Spain).
- Member of the Scientific Advisory Committee of the *Europhysics Conferences on Atomic and Molecular Processes in Ionized Gases (ESCAPEIG)*. Period 2012-2016.

Belén Maté Naya.

- President of the "Comité de Espectroscopia" of the *Sociedad Española de Optica- SEDOPTICA* (Spain).
- Miembro del Comité Científico de la *XII Reunión Nacional de Optica (XIRNO, Salamanca, España, 2015)*.

Vicente Timón Salinero.

- Member of the board of the Sociedad Española de Mineralogía (SEM) (Spain).

5.3.4 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS**Tiberio A. Ezquerro Sanz.**

- Member of the *International Dielectric Society Board* of the *International Dielectric Society* (<http://permittivity.org>).

Aurora Nogales Ruiz.

- Member for Science Europe Research Infrastructures Working Group.
- Member of the Facility Access Panel 5 from the ISIS Neutron Source, Rutherford Appleton Laboratory, UK.
- Member of the Subcommittee 9 'Structure and Dynamics of Soft-condensed Matter' of the Institute Laue Langevin.

Mari Cruz García Gutiérrez.

- Spanish Delegate of the European Synchrotron Radiation Facility Council, since September 2014.
- President of the Executive Board of the Spanish Synchrotron Users Organization (AUSE), since September 2013 (<http://www.ual.es/Congresos/AUSE/>).
- CSIC representative of the SpLine-BM25 Scientific Committee at the European Synchrotron Radiation Facility since June 2015.
- Member of the Facility Access Panel for the SpLine-BM25 beamline at the European Synchrotron Radiation Facility since October 2015.
- Member of Editorial Board of the journal "ISRN Nanomaterials" since March 2012.
- Senior Editor of the "Journal of Nanoscience Letters" since June 2014.
- Guest Editor of the European Polymer Journal (Elsevier) since July 2015.

Juan Francisco Vega Borrego.

- Member of the Executive Board of *Grupo Especializado de Reología (GER)* of Real Sociedad Española de Química (RSEQ).

5.4 ACTIVIDADES Y MATERIAL DE DIVULGACIÓN / OUTREACH ACTIVITIES AND MATERIAL

5.4.1 DPTO. DE QUÍMICA Y FÍSICA TEÓRICAS / THEORETICAL PHYSICS AND CHEMISTRY

José González Carmona.

El grafeno y sus parientes (nanotubos y fullerenos).

Charla divulgativa – Semana de la Ciencia. Instituto de Estructura de la Materia (CSIC).

Madrid.

11th of November 2015.

Jesús Fernando Barbero González.

¿Qué es la Relatividad?, I.E.S. Orden de Santiago (Horcajo de Santiago, Cuenca), 25 de marzo de 2015.

Materiales Asombrosos, Colegio Nuestra Señora de la Providencia (Madrid), 7 de abril de 2015.

¿Qué es la Relatividad?, Colegio Nuestra Señora de la Providencia (Madrid), 7 de abril de 2015.

Materiales Asombrosos, I.E.S. Narcís Monturiol (Parla, Madrid), 8 de abril de 2015.

¿Qué es la Relatividad?, I.E.S. Narcís Monturiol (Parla, Madrid), 8 de abril de 2015.

Materiales Asombrosos, I.E.S. Sapere Aude (Villanueva del Pardillo, Madrid), 9 de abril de 2015.

¿Qué es la Relatividad?, I.E.S. Sapere Aude (Villanueva del Pardillo, Madrid), 9 de abril de 2015.

Materiales Asombrosos, I.E.S. Miguel Delibes (Torrejón de la Calzada, Madrid), 13 de abril de 2015.

¿Qué es la Relatividad?, I.E.S. Miguel Delibes (Torrejón de la Calzada, Madrid), 13 de abril de 2015.

Materiales Asombrosos, I.E.S. Margarita Salas (Majadahonda, Madrid), 15 de abril de 2015.

¿Qué es la Relatividad?, I.E.S. Margarita Salas (Majadahonda, Madrid), 15 de abril de 2015.

Materiales Asombrosos, I.E.S. Profesor Máximo Trueba (Boadilla del Monte, Madrid), 16 de abril de 2015.

¿Qué es la Relatividad?, I.E.S. Profesor Máximo Trueba (Boadilla del Monte, Madrid), 16 de abril de 2015.

Materiales Asombrosos, I.E.S. José de Churruquera (Leganés, Madrid), 17 de abril de 2015.

¿Qué es la Relatividad?, I.E.S. José de Churruquera (Leganés, Madrid), 17 de abril de 2015.

¿Qué es la Relatividad?, Asociación Astronómica de Madrid, invitado por Juan Llabrés y Enrique Velarde, 23 de junio de 2015.

Materiales Asombrosos, I.E.S. Fortuny (Madrid), 14 de octubre de 2015.

¿Qué es la Relatividad?, I.E.S. Juana de Castilla (Madrid), 15 de octubre de 2015.

Materiales Asombrosos, I.E.S. Isabel la Católica (Madrid), 15 de octubre de 2015.

Materiales Asombrosos, I.E.S. Juan de Herrera (San Lorenzo del Escorial, Madrid), 12 de noviembre de 2015.

¿Qué es la Relatividad?, I.E.S. Juan de Herrera (San Lorenzo del Escorial, Madrid), 12 de noviembre de 2015.

Materiales Asombrosos, I.E.S. Renacimiento (Madrid), 18 de noviembre de 2015.

Materiales Asombrosos, I.E.S. Fortuny (Madrid), 15 de diciembre de 2015.

Explorando el Sistema Solar, I.E.S. Satafi (Getafe, Madrid), 16 de diciembre de 2015.

Materiales Asombrosos, I.E.S. Los Rosales (Móstoles, Madrid), 17 de diciembre de 2015.

La Relatividad y el año de la luz.

Instituto de Estructura de la Materia (CSIC), Semana de la Ciencia de Madrid

5th of november 2015.

Explorando el Sistema Solar.

Instituto de Estructura de la Materia (CSIC), Semana de la Ciencia de Madrid

10th of november 2015.

Guillermo A. Mena Marugán.

Relativamente 100 años.

Charla divulgativa – Semana de la Ciencia. Edificio Central del CSIC. Madrid.

6th of November 2015.

Relatos relativistas.

Acto de celebración del centenario de la Relatividad General- Organizador y participante en la mesa redonda– Semana de la Ciencia. Edificio Central del CSIC.
Madrid.
6th of November 2015.

Los investigadores, ante las claves del universo: 100 años de la Teoría de la Relatividad General. Materia Cuántica

Artículo divulgativo – Revista El Cultural (<http://www.elcultural.com/revista/ciencia/Los-investigadores-ante-las-claves-del-universo/37177>)
6th of December 2015.

Rafael A. Molina Fernández.***Los átomos.***

Charla divulgativa – Aula de Humanidades del Ayuntamiento de Guadarrama.
Guadarrama (Madrid).
20th of May 2015.

Los átomos.

Charla divulgativa – Semana de la Ciencia. Instituto de Estructura de la Materia (CSIC).
Madrid.
3rd of November 2015.

Jordi Mur Petit.***¿Qué es la luz? El Año Internacional de la Luz 2015.***

Charla divulgativa – Aula de Humanidades del Ayuntamiento de Guadarrama.
Guadarrama (Madrid).
20th of May 2015.

Chapter on progress in Physics in 2015 "Física 2015" within the "Anuari 2015" of Catalan Encyclopedia.

Chapter on the Centenary of General Relativity "Centenari de la Teoria general de la relativitat" within the "Anuari 2015" of Catalan Encyclopedia.

Juan Margalef Bentabol.

La Alhambra, Escher y 17 ;el número mágico! (public lecture). XV Semana de la ciencia, Madrid (Spain).
13th of November 2015

Óscar Moreno Díaz.

Publicación de entrevista sobre el proyecto Marie Curie Internacional 'Electroweak', Tribuna Complutense, número 151, p. 20, 9 de marzo de 2015.

Artículo sobre el proyecto Marie Curie Internacional 'Electroweak', Revista Española de Física (Publicación de la Real Sociedad Española de Física), volumen 29, número 2, p. 1, abril-junio 2015.

5.4.2 DPTO. DE ESPECTROSCOPÍA NUCLEAR, VIBRACIONAL Y DE MEDIOS DESORDENADOS / NUCLEAR, VIBRATIONAL AND DISORDERED MEDIA SPECTROSCOPY

Santiago Sánchez Cortés.

Visita a los *Laboratorios de Microscopía Raman-SERS*.
XV Semana de la Ciencia--Organiza IEM, CSIC.
Centro de Física “Miguel A. Catalán”. C/ Serrano 121, Madrid.
3rd of November 2015.

José Vicente García Ramos.

Pero entonces, ¿qué es la luz?
Blog “Ciencia para llevar. El Blog del CSIC”-- Periódico 20Minutos.
<http://blogs.20minutos.es/ciencia-para-llevar-csic/2015/01/20/pero-entonces-que-es-la-luz/>
20th of January 2015.

Representación teatral *Científicas ab initio: pioneras, intrusas y únicas*
 Grupo TeatrlIEM (grupo de teatro del Instituto de Estructura de la Materia).
 Director y Actor: J. Vicente García-Ramos; Montaje y dramaturgia: J.Vicente García-Ramos.
 --Centro Cívico “Villagrande”, Alcorcón, Madrid, January 2015.
 --Residencia de Estudiantes- C/ Pinar 21, Madrid, 28th of February 2015.
 --Centro Cívico Valdemoro, Madrid, March 2015.
 --Fundación Olivar de Castillejo-C/Menendez Pidal 3bis, Madrid, 12th of September 2015.

Representaciones teatrales *Discronía* (de José Sanchís Sinisterra), *BRGS y 581 Mapas* (de Juan Mayorga).
 Grupo TeatrlIEM –Organiza “Olimpiada Filosófica de España”.
 Director: J. Vicente García-Ramos.
 25th of April 2015.

Firma de autor del libro *Qué sabemos de... Las Moléculas: cuando la luz te ayuda a vibrar.*
 Feria del Libro de Madrid.
 Editorial CSIC y Los Libros de la Catarata.
 June 2015.

Presentación como autor del libro *Qué sabemos de... Las Moléculas: cuando la luz te ayuda a vibrar.*
 Ayuntamiento de Aigües (Alicante).
 Editorial CSIC y Los Libros de la Catarata.
 July 2015.

Representación teatral *La tortuga de Darwin* (de Juan Mayorga).
 Grupo TeatrlIEM -- XV Semana de la Ciencia.
 Director: J. Vicente García-Ramos.
 Instituto de Estructura de la Materia y Museo Nacional de Ciencias Naturales, Madrid.
 7th of November 2015.

Director de *Discronía* de José Sanchís Sinisterra y participación en el coloquio *Relatos de relatividad*
 XV Semana de la Ciencia
 Instituto de Estructura de la Materia, CSIC.
 November 2015.

Representación teatral *Encuentros en la interfase: entre la Ficción y la Ciencia.*
 Grupo TeatrlIEM -- XV Semana de la Ciencia.
 Director y Actor: J. Vicente García-Ramos.
 Montaje y dramaturgia: J.V. García-Ramos.
 Instituto de Estructura de la Materia y Museo Nacional de C.C. Naturales, Madrid.
 (3 representaciones, una de ellas para estudiantes de Secundaria).
 13th and 14th of November 2015.

Participación en capítulo del libro de divulgación *Protagonistas de la Ciencia.*
 Editoras: Mónica Lara y Pilar Tigeras.
 Editorial CSIC y Los Libros de la Catarata.
 November 2015.

Pedro Carmona Hernández.

Artículo de revista *Estudian cómo desarrollar productos cárnicos con un mejor contenido lipídico, mediante la sustitución de grasa animal por agentes de carga de aceite de oliva.*
 Revista Alimentaria nº 463.
 May 2015.

Sagrario Martínez Ramírez.

Mis primeros pasos en la investigación.
 Charla-Taller- Programa de Colaboración con Instituciones Educativas. Organiza Comunidad de Madrid.
 Madrid (Spain)
 11th of April 2015.

De la cal al cemento.
 Taller y Prácticas de Laboratorio, Programa de Colaboración con Instituciones Educativas.
 IES “Ramiro de Maeztu”, Madrid
 26th of March, 16th-17th of April.

Historia de los materiales artificiales de construcción: de la cal al cemento.

Charla -XV Semana de la Ciencia--Organiza IEM, CSIC.

<http://www.iem.csic.es/semanaciencia/semanaciencia15/semciencia15-martinez.pdf>.

Centro de Física “Miguel A. Catalán”. C/ Serrano 121, Madrid

6th of November 2015.*Mis primeros pasos en la investigación.*

Taller- XV Semana de la Ciencia--Organiza IEM, CSIC.

Colegio “Nuestra señora de Fátima”, Madrid (Spain),

4th of November

Colegio “Ciudad de Columbia”, Tres Cantos, Madrid (Spain)

12th of November.*Conglomerantes hidráulicos: de la cal al cemento*

Programa de Colaboración CSIC y Centros Educativos de Excelencia de la Comunidad de Madrid.

IES “Margarita Salas”, Mahadahonda, Madrid

3rd of December 2015.*Mis primeros pasos en la investigación.*

Taller del Proyecto Ciudad Ciencia--Organiza CSIC y Obra Social “La Caixa”

Mejorada del Campo, Madrid

15th of December 2015.**Diego Romero Abujetas.**Actor en la obra de teatro: *Científicas ab initio: pioneras, intrusas y únicas*

Grupo TeatRIEM (grupo de teatro del Instituto de Estructura de la Materia).

Montaje y Dramaturgia: J. Vicente García-Ramos.

-Centro Cívico "Viñagrande" (Alcorcón): 18th of January 2015.-IES Maestro Matías Bravo (Valdemoro): 20th of February 2015.-Residencia de Estudiantes (CSIC): 28th of February 2105.-Fundación Olivar de Castillejo (Madrid): 12th of September 2015.Actor en la obra de teatro: *Encuentros en la interfase: entre la Ficción y la Ciencia.*

Grupo TeatRIEM -- XV Semana de la Ciencia.

Montaje y Dramaturgia: J. Vicente García-Ramos.

Museo Nacional de Ciencias Naturales, Madrid.

13th and 14th of November 2015.Taller: *Aplicaciones de la luz: Fluorescencia y Fibras Ópticas.*

IES Ramiro de Maeztu (Madrid)

5th of February 2015.Taller: *Jugar con la Luz: la Maleta Óptica.*CEIP “El Porvenir” (Madrid): 12th of May 2015.

IES “Concepción Arenal” (Madrid): 3th of June 2015.

Centro Social y Cultural “La Casa Encendida” (Madrid)

31st of October 2015.Taller: *Descubriendo la Luz.*

Proyecto Ciudad Ciencia.

Casa de la Cultura de Los Llanos de Aridane, La Palma (Tenerife).

19th and 20th of November 2015.**Rocío Gutiérrez Contreras.**Taller *Jugar con la luz: la maleta óptica*Colegio “El Porvenir”, Madrid, 13th of May 2015.Colegio “Concepción Arenal”, 3rd of June 2015.*De la cal al cemento.*

Prácticas de Laboratorio, Programa de Colaboración con Instituciones Educativas.

IES “Ramiro de Maeztu”, Madrid

16th-17th of April 2015.

Actriz en la obra de teatro: *Encuentros en la interfase: entre la Ficción y la Ciencia.*
 Grupo TeatIEM -- XV Semana de la Ciencia.
 Montaje y Dramaturgia: J. Vicente García-Ramos.
 Museo Nacional de Ciencias Naturales, Madrid.
 13th and 14th of November 2015.

Irene Marroquín Alonso.

IS577: Multi-particle emission from 31Ar at IDS (analysis is on-going)
 Artículo en "ISOLDE Newsletter Spring 2015".
http://isolde.web.cern.ch/sites/isolde.web.cern.ch/files/April%202015_0.pdf
 March 2015.

Moisés Martín Garrido.

Mis primeros pasos en la investigación.
 Taller del Proyecto Ciudad Ciencia--Organiza CSIC y Obra Social "La Caixa"
 Mejorada del Campo, Madrid
 15th of December 2015.

Mis primeros pasos en la investigación.
 Taller- XV Semana de la Ciencia--Organiza CSIC-Comunidad de Madrid.
 Colegio "Nuestra señora de Fátima", Madrid (Spain), 4th of November 2015.
 Colegio "Ciudad de Columbia", Tres Cantos, Madrid (Spain),
 12th of November 2015.

5.4.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS

José M. Fernández Sánchez, y Guzmán Tejeda Gala.

El Laboratorio de Fluidodinámica Molecular
Conference and guided visit to students of I.E.S. San Isidro de Madrid.
 Instituto de Estructura de la Materia (CSIC) Madrid
 14th May 2015.

Isabel Tanarro Onrubia.

"Estudio de la naturaleza y propiedades del plasma, el cuarto estado de la materia. Experimentos con plasmas fríos producidos en descargas eléctricas de gases a baja presión".
 Programa 4º ESO + Empresa de la Comunidad de Madrid, 23th-26th of April 2015, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC.

Belén Maté, Miguel Ángel Moreno, y Ángel González Valdenebro.

"Efectos ópticos en la atmósfera." Experimentos caseros de dispersión cromática, y taller para niños titulado "el Disco de Newton".
 Stand SEDOPTICA. Finde científico del Museo Nacional de Ciencia y Tecnología (MUNCYT)
 Madrid, 30th-31st of May 2015.

Vicente Timón Salinero.

La ciencia y sus experimentos caseros
 XV Semana de la Ciencia de la Comunidad de Madrid
 2nd-15th of November 2015

La física computacional: Un camino desde el átomo hasta el Universo
 XV Semana de la Ciencia de la Comunidad de Madrid
 6th of November 2015

Óscar Gálvez González.

¿Qué es la Química Cuántica y para qué sirve?
 XV Semana de la Ciencia de la Comunidad de Madrid. IEM-CSIC.
 5th of November 2015.

5.4.4 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

Tiberio A. Ezquerra Sanz.

Actor in “*Científicas “ab initio”: Pioneras, intrusas y únicas*”.
 Scientific theater - TeatrIEM
 -Centro Cívico “Viñagrande”, Alcorcón, Madrid
 24th of January 2015.

-Valdemoro (for students)
 20th of February 2015.

-Residencia de Estudiantes, Madrid
 1st of March 2015.

-Fundación Olivar de Castillejo, Madrid
 12th of September 2015.

Actor in “*Encuentros en la interfase: Entre la ficción y la ciencia*”
 Scientific theater - TeatrIEM
 XV Semana de la Ciencia
 - Museo Nacional de Ciencias Naturales, CSIC, José Abascal 9, Madrid
 13th-14th of November 2015.

Víctor L. Cruz Cañas.

XII Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia. *Visita guiada al “cluster” de cálculo científico.*
 24th of March 2015.

Mari Cruz García Gutiérrez.

Actress and assistant director in “*Científicas “ab initio”: Pioneras, intrusas y únicas*”.
 Scientific theater – TeatrIEM
 - Centro Cívico “Viñagrande”, Alcorcón, Madrid. 24th of January 2015
 - Valdemoro (for students), 20th of February 2015
 - Residencia de Estudiantes, Madrid. 1st of March
 - Fundación Olivar de Castillejo, Madrid. 12th of September 2015

Actress in “*Encuentros en la interfase: Entre la ficción y la ciencia*”
 Scientific theater - TeatrIEM
 XV Semana de la Ciencia
 - Museo Nacional de Ciencias Naturales, CSIC, José Abascal 9, Madrid. 13th-14th of November 2015.

Javier Ramos Díaz.

Modelización y simulación de materiales.
 Webminar (Addlink Software Científico).
<https://www.addlink.es/videos-todos>
 5th of February 2015.

Mecánica y dinámica molecular clásica.
 Webminar (Addlink Software Científico).
<https://www.addlink.es/videos-todos>
 26th of February 2015.

Herramientas mecano-cuánticas basadas en DFT para el estudio de moléculas y materiales
 Webminar (Addlink Software Científico).
<https://www.addlink.es/videos-todos>
 23th of April 2015.

5.5 TRANSFERENCIA DE TECNOLOGÍA / TRANSFER OF TECHNOLOGY

5.5.2 DPTO. DPTO. DE ESPECTROSCOPÍA NUCLEAR, VIBRACIONAL Y DE MEDIOS DESORDENADOS / NUCLEAR, VIBRATIONAL AND DISORDERED MEDIA SPECTROSCOPY

Santiago Sánchez Cortés.

- Member of the Scientific Advisory Committee of the *Regulaxis SAS Company* from Technological Park in Paris (France).
- Member of the Scientific Advisory Committee of the company *SAFTRA Photonics*, from Kosice (Slovak Republic).

5.5.4 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

Informes de transferencia tecnológica

Javier Ramos Díaz.

- Developing Monte Carlo code to simulate polyolefins and their copolymers Mitsui Chemicals, Inc. (February-December 2015).

5.6 UNIDADES ASOCIADAS Y OTRAS ACTIVIDADES / ASSOCIATED UNITS AND OTHER ACTIVITIES

5.6.1 DPTO. DE QUÍMICA Y FÍSICA TEÓRICAS / THEORETICAL PHYSICS AND CHEMISTRY

Unidades Asociadas / Associated Units:

Jorge Dukelsky Bercovich.

- *Department of Física Atómica, Molecular y Nuclear*, University of Sevilla, Associated Unit at CSIC.
Responsible: José Miguel Arias

Jesús Fernando Barbero González.

- *Group of Teorías de Campos y Física Estadística, Instituto Universitario Gregorio Millán Barbany*, University of Carlos III de Madrid. Associated Unit at CSIC.
Responsible: Eduardo Jesús Sánchez Villaseñor.

Otras actividades / Other activities:

Jorge Dukelsky Bercovich. Short stays:

- Cavendish Laboratory, University of Cambridge, UK, 9th-13th of February 2015.

Jordi Mur Petit. Short stays:

- Northwestern University, Evanston (IL), USA, 25th-27th of March 2015.
- University of British Columbia, Vancouver, Canada, 6th-8th of April 2015.
- University of Oxford, Oxford, UK, 29th-30th of April 2015.
- University of Sussex, Brighton, UK, 30th of April-2nd of May 2015.

5.6.2 DPTO. DE ESPECTROSCOPIA NUCLEAR, VIBRACIONAL Y DE MEDIOS DESORDENADOS / *NUCLEAR, VIBRATIONAL AND DISORDERED MEDIA SPECTROSCOPY*

Unidades Asociadas / Associated Units:

Santiago Sánchez Cortés.

- *Group of Spectroscopy and Molecular Structure* (Departament of Physical Chemistry) from the University of Málaga. Associated Unit at CSIC.
Responsible: Juan Carlos Otero.

Otras actividades / Other activities:

Santiago Sánchez Cortés. Short stays:

- Laboratoire de Spectrométrie des Matériaux et Archéomatériaux (LASMAR), Université Moulay Ismail, Morocco, 21st-26th of July 2015.

José A. Sánchez Gil. Short stays:

- “P. J. Safarik of Kosice” University, Slovak Republic, 12th-16th of July 2015.

Irene Marroquín Alonso. Short stays:

- ISOLDE, CERN, Geneva, Switzerland, 13th-18th of October 2015.

Enrique Nácher González. Short stays:

- RIKEN Nishina Center for Accelerator-Based Science, Japan, 8th-11th of April 2015.
- CERN, ISOLDE, Geneva, Switzerland, 8th-12th of November 2015.

5.6.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / *MOLECULAR PHYSICS*

Unidades Asociadas / Associated Units:

Víctor J. Herrero Ruiz de Loizaga

- *Molecular Physical Chemistry*, comprising IEM-CSIC, IQFR-CSIC, IFF-CSIC and Department Química Física I, Universidad Complutense de Madrid.
Responsible: F. Javier Aoiz

Otras actividades / Other activities:

Dionisio Bermejo

- Groupe de recherche international (GDRI), HiResMIR (High Resolution Microwave, Infrared and Raman molecular spectroscopy for atmospheric, planetologic and astrophysical applications)

5.6.4 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / *MACROMOLECULAR PHYSICS*

Otras actividades / Other activities:

Tiberio Ezquerra Sanz. Short stays:

- Measurements in the Spanish Synchrotron ALBA, Barcelona, Spain, 27th-31th of May 2015.
- Measurements in the Deutsches Elektronen Synchrotron DESY, PETRA II Hamburgo, 14th-19th of August 2015.
- Measurements in the European Synchrotron Radiation Facility (ESRF), (beamline BM26). Grenoble, France, 29th of November-4th of December 2015.

Aurora Nogales Ruiz. Short stays:

- Measurements in the European Synchrotron Radiation Facility (ESRF), Grenoble, France, 29th of November-2th of December 2015.

Fernando Ania García. Short stays:

- Experiments at the synchrotron ALBA (BL11), Barcelona, Spain, 14th-17th of July 2015.
- Experiments at the synchrotron PETRA (P03), Hamburg, Germany, 18th-21th of September 2015.

Araceli Flores Aguilar-Amat. Short stays:

- Experiments at the synchrotron ALBA (BL11), Barcelona, Spain, 14th-17th of July 2015.
- Attendance to “The Polymer Group and MML Celebration Conference”, University of Cambridge, U.K., 25th-26th of September 2015.

Mari Cruz García Gutiérrez. Short stays:

- Measurements in the European Synchrotron Radiation Facility (ESRF), (beamline BM26). Grenoble, France, 29th of November-4th of December 2015.
- Participation in the Scientific Advisory Committee meeting of the Synchrotron ALBA, Barcelona, Spain, 22nd-23rd of June 2015.
- Participation as Spanish Delegate in the ESRF Council. Grenoble, France, 29th-30th of December 2015.
- Participation as Spanish Delegate in the ESRF Council. Grenoble, France, 30th of November-1st of December 2015.
- Participation in the Scientific Advisory Committee meeting of the Synchrotron ALBA, Barcelona, Spain, 10th-11th of December 2015.

Patricia Enrique Jiménez. Short stays:

- Experiments at the synchrotron ALBA (BL11), Barcelona, Spain, 14th-17th of July 2015.
- Experiments at the synchrotron PETRA (P03), Hamburg, Germany, 18th-21th of September 2015.

CAPÍTULO 6
**PUBLICACIONES Y PRODUCCIÓN
CIENTÍFICA**

CHAPTER 6
***PUBLICATIONS AND SCIENTIFIC
PRODUCTION***

6.1 **PUBLICACIONES EN REVISTAS Y PROCEEDINGS ISI /** **ISI PUBLICATIONS**

6.1.1 **DPTO. DE QUÍMICA Y FÍSICA TEÓRICAS / THEORETICAL PHYSICS AND CHEMISTRY**

1. A. Alonso-Serrano, L. J. Garay, and G. A. Mena Marugán.
Quantum Correlations across Horizons.
 Journal of Physics Conference Series **600**, 012016 (2015).
2. G. Balerdi, J. Woodhouse, R. de Nalda, M. L. Senent, A. García-Vela, and L. Banares.
Imaging the predissociation dynamics of the methyl radical from the 3(pz) Rydberg state.
 Journal of Physics Conference Series, **635**, 112032 (2015).
3. L.C. Barbado, C. Barceló, and L. J. Garay.
Quantum Frictionless Trajectories versus Geodesics.
 Physical Review D **92**, 084031 (2015).
4. J. F. Barbero G.
Einstein, la luz, el espacio-tiempo y los cuantos.
 Arbor **191**, 775 (2015).
5. J. F. Barbero G., J. Salas, and E. J. S. Villaseñor.
Generalized Stirling permutations and forests: Higher-order Eulerian and Ward numbers.
 Electronic Journal of Combinatorics **22**, P3.37 (2015).
6. J. F. Barbero G., A. Benito, Juárez-Aubry, J. Margalef-Bentabol, and E. J. S. Villaseñor.
Quantization of scalar fields coupled to point-masses.
 Classical and Quantum Gravity **32**, 245009 (2015).
7. J. F. Barbero G., J. Prieto Arranz, and E. J. S. Villaseñor.
Gauge invariance in simple mechanical systems.
 European Journal of Physics **36**, 055005 (2015).
8. C. Barceló, R. Carballo-Rubio, and L. J. Garay.
Uncovering the Effective Spacetime: Lessons from the Effective Field Theory Rationale.
 International Journal of Modern Physics D **24**, 1544019 (2015).
9. C. Barceló, R. Carballo-Rubio, L. J. Garay, and Gil Jannes.
Do Transient White Holes Have a Place in Nature?
 Journal of Physics Conference Series **600**, 012033 (2015).
10. C. Barceló, R. Carballo-Rubio, L. J. Garay, and Gil Jannes.
The Lifetime Problem of Evaporating Black Holes: Mutiny or Resignation.
 Classical and Quantum Gravity **32**, 035012 (2015).
11. A. Barrau, M. Bojowald, G. Calcagni, J. Grain, and M. Kagan.
Anomaly-free cosmological perturbations in effective canonical quantum gravity.
 Journal of Cosmology and Astroparticle Physics **1505**, 051 (2015).
12. A. Blasco, L. J. Garay, M. Martín-Benito, and E. Martín-Martínez.
The Quantum Echo of the Early Universe.
 Canadian Journal of Physics **93**, 968 (2015).
13. A. Blasco, L. J. Garay, M. Martín-Benito, and E. Martín-Martínez.
Violation of the Strong Huygen's Principle and Timelike Signals from the Early Universe.
 Physical Review Letters **114**, 141103 (2015).
14. J. M. Boillos and P. Sarriuguren.
Effects of deformation on the beta-decay patterns of light even-even and odd-mass Hg and Pt isotopes.
 Physical Review C **91**, 034311 (2015).

15. R. Boussesi, S. Guziani, M. L. Senent, and N. Jaïdane.
Theoretical spectroscopic characterization of Dimethyl Carbonate, OC(OCH₃)₂, at low temperatures.
Journal of Physical Chemistry A **119**, 4057 (2015).
16. G. Calcagni and L. Modesto.
Nonlocal quantum gravity and M-theory.
Physical Review D **91**, 124059 (2015).
17. G. Calcagni, D. Oriti, and J. Thürigen.
Dimensional flow in discrete quantum geometries.
Physical Review D **91**, 084047 (2015).
18. G. Calcagni, C. Kiefer, and C.F. Steinwachs.
What can quantum cosmology say about the inflationary universe?
Journal of Physics Conf. Ser. **626**, 012003 (2015).
19. R. Carballo-Rubio, C. Barceló, and L. J. Garay.
Absence of Cosmological Constant Problem in Special Relativistic Field Theory of Gravity: One-Loop Renormalization Group.
Journal of Physics Conference Series **600**, 012032 (2015).
20. R. Carballo-Rubio, C. Barceló, and L. J. Garay.
Some not-so-Common Ideas about Gravity.
Journal of Physics Conference Series **600**, 012010 (2015).
21. L. Castelló Gomar, M. Martín-Benito, and G. A. Mena Marugán.
Gauge-Invariant Perturbations in Hybrid Quantum Cosmology.
Journal of Cosmology and Astroparticle Physics **1506**, 06, 045 (2015).
22. J. Cortez, G. A. Mena Marugán, and J. M. Velhinho.
Quantum Unitary Dynamics in Cosmological Spacetimes.
Annals of Physics **363**, 36 (2015).
23. J. Cortez, B. Elizaga Navascués, M. Martín-Benito, G. A. Mena Marugán, and J. M. Velhinho.
Unitary Evolution and Uniqueness of the Fock Representation of Dirac Fields in Cosmological Spacetimes.
Physical Review D **92**, 105013 (2015).
24. S. Dalbouha, M. L. Senent, and N. Komiha.
Theoretical spectroscopic characterization at low temperatures of Methyl Hydroperoxide and various S-analogs.
Journal of Chemical Physics **142**, 074304 (2015).
25. J. Dukelsky.
Integrable Richardson-Gaudin models in mesoscopic physics.
Romanian Journal of Physics **60**, 753 (2015).
26. B. Elizaga Navascués, M. Martín-Benito, and G. A. Mena Marugán.
Modified FRW Cosmologies Arising from States of the Hybrid Quantum Gowdy Model.
Physical Review D **92**, 024007 (2015).
27. B. Elizaga Navascués, M. Martín-Benito, and G. A. Mena Marugán.
Modeling Effective FRW Cosmologies with Perfect Fluids from States of the Hybrid Quantum Gowdy Model.
Physical Review D **91**, 024028 (2015).
28. C. Esebbag and J. Dukelsky.
The Elliptic Gaudin Model: a Numerical Study.
Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical **48**, 475303 (2015).

29. Y. Fujita, H. Fujita, T. Adachi, G. Susoy, A. Algora, C. L. Bai, G. Colò, M. Csatlós, J. M. Deaven, E. Estevez-Aguado, C. J. Guess, J. Gulyás, K. Hatanaka, K. Hirota, M. Honma, D. Ishikawa, A. Krasznahorkay, H. Matsubara, R. Meharchand, F. Molina, H. Nakada, H. Okamura, J. Ong, T. Otsuka, G. Perdikakis, B. Rubio, H. Sagawa, P. Sarriguren, C. Scholl, Y. Shimbara, E. J. Stephenson, T. Suzuki, A. Tamii, J. H. Thies, K. Yoshida, R. G. T. Zegers, and J. Zenihiro.
High-resolution study of Gamow-Teller excitations in the $^{42}\text{Ca}(^{3}\text{He},t)^{42}\text{Sc}$ reaction and the observation of a low-energy super-Gamow-Teller state.
Physical Review C **91**, 064316 (2015).
30. M. K. Gaidarov, A.N. Antonov, P. Sarriguren, and E. Moya de Guerra.
Ground-state properties and symmetry energy of Mg isotopes with $A=20-36$.
Acta Physica Polonica B Proceedings Supplement **8**, 575 (2015).
31. E. Garrido.
Three-body continuum wave functions with a box boundary condition.
Few-body Systems **56**, 829 (2015).
32. E. Garrido, A. S. Jensen, and D. V. Fedorov.
Three-body bremsstrahlung and the rotational character of the ^{12}C spectrum.
Physical Review C **91**, 054003 (2015).
33. J. M. G. Gómez, E. Faleiro, L. Muñoz, R. A. Molina, and A. Relaño.
Shell model studies of chaos and statistical properties in nuclei.
Journal of Physics Conference Series **580**, 012045 (2015).
34. J. González.
Phase diagram of the Quantum Electrodynamics of 2D and 3D Dirac semimetals.
Physical Review B **92**, 125115 (2015).
35. J. González.
Strong-coupling phases of 3D Dirac and Weyl semimetals. A renormalization group approach.
Journal of High Energy Physics **10**, 190 (2015).
36. S. Greschner, D. Huerga, GY. Sun, Poletti, and L. Santos.
Density-dependent synthetic magnetism for ultracold atoms in optical lattices
Physical Review B **92**, 11 (2015).
37. M. Hochlaf, C. Puzzarini, and M. L. Senent.
Towards the computations of accurate spectroscopic parameters and vibrational spectra for organic compounds.
Molecular Physics **113**, 1661 (2015).
38. O. Legeza, L. Veis, A. Poves, and J. Dukelsky.
Advanced density matrix renormalization group method for nuclear structure calculations.
Physical Review C **92**, 051303 (2015).
39. J. Mur-Petit and J. J. García-Ripoll.
Measuring molecular electric dipoles using trapped atomic ions and ultrafast laser pulses.
Physical Review A **91**, 012504 (2015).
40. J. Mur-Petit and R. A. Molina.
Spectral statistics of molecular resonances in erbium isotopes: How chaotic are they?
Physical Review E **92**, 042906 (2015).
41. D. Navas-Nicolás and P. Sarriguren.
Gamow-Teller properties of the double-beta-decay partners $^{116}\text{Cd}(\text{Sn})$ and $^{150}\text{Nd}(\text{Sm})$.
Physical Review C **91**, 024317 (2015).
42. S. Thiago, Pereira, S. Carneiro, and G. A. Mena Marugán.
Cosmological Signatures of Anisotropic Spatial Curvature.
Journal of Cosmology and Astroparticle Physics **1507** (2015).

43. S. Pittel, C. Esebbag, and J. Dukelsky.
Improvement to the Projected BCS Approximation.
Journal of Physics Conference Series **639**, 012009 (2015).
44. M. Salah, K. Marakchi, S. Dalbouha, M. L. Senent, OK. Kabbaj, and N. Komiha.
Influence of the functionalization of Imidazole on CO₂ uptake efficiency of ZIFs. A theoretical contribution.
Computational and Theoretical Chemistry **1073**, 1 (2015).
45. P. Sarriguren.
Beta-decay properties of neutron-rich Ge, Se, Kr, Sr, Ru, and Pd isotopes from deformed quasiparticle random-phase approximation.
Physical Review C **91**, 044304 (2015).
46. P. Sarriguren, J. M. Boillos, O. Moreno, and E. Moya de Guerra.
Beta-decay properties of neutron-deficient Pt, Hg, and Pb isotopes.
AIP Conference Proceedings **1681**, 050007 (2015).
47. M. L. Senent, S. Dalbouha, A. Cuisset, and D. Sadovskii.
Theoretical spectroscopic characterization at low temperatures of dimethylsulfoxide. The role of anharmonicity.
Journal of Physical Chemistry A **119**, 9644 (2015).
48. M. L. Senent, Y. Kalugina, C. Balança, F. Lique, and N. Feautrier.
A new ab initio potential energy surface for the collisional excitation of N₂H⁺ by H₂.
Journal of Chemical Physics **143**, 024301 (2015).

PUBLICACIONES CONJUNTAS CON EL DPTO. DE ENVYMED / PUBLICATIONS IN COMMON WITH ENVYMED DEPARTMENT

49. M.E. Estévez Aguado, A. Algora, J. Agramunt, B. Rubio, J. L. Taín, D. Jordán, L. M. Fraile, W. Gelletly, A. Frank, M. Csatlós, L. Csige, Zs. Dombrádi, A. Krasznahorkay, E. Nácher, P. Sarriguren, M.J.G. Borge, J.A. Briz, O. Tengblad, F. Molina, O. Moreno, M. Kowalska, V. N. Fedossev, B.A. Marsh, D.V. Fedorov, P.L. Molkanov, A.N. Andreyev, M.D. Seliverstov, K. Burkard, and W. Hüller.
Shapes of 192,190Pb ground states from beta-decay studies using the total-absorption technique.
Physical Review C **92**, 044321 (2015).
50. J. A. Briz, E. Nácher, M.J.G. Borge, A. Algora, B. Rubio, Ph. Dessagne, A. Maira, D. Cano-Ott, S. Courtin, D. Escrig, L. M. Fraile, W. Gelletly, A. Jungclaus, G. Le Scornet, F. Maréchal, Ch. Miehé, E. Poirier, A. Poves, P. Sarriguren, J. L. Taín, and O. Tengblad.
Shape study of the N = Z nucleus 72Kr via beta decay.
Physical Review C **92**, 054326 (2015).

PUBLICACIONES CONJUNTAS CON EL DPTO. DE FISICA MOLECULAR/ PUBLICATIONS IN COMMON WITH THE MOLECULAR PHYSICS DEPARTMENT

51. S. Dalbouha, P. Muthuramalingam, V. Timón, N. Komiha, M. Hochlaf and M. L. Senent.
Explicitly correlated determination of Interaction Potential Energy Surfaces of the Imidazole+CO₂ complex.
Theoretical Chemistry Accounts **134**, 63 (2015).
52. V. Timón, M. L. Senent and M. Hochlaf.
Structural single and multiple molecular adsorption of CO₂ and H₂O in zeolitic imidazolate framework (ZIF) crystals.
Microporous and Mesoporous Materials **218**, 33 (2015).

6.1.2 DPTO. DE ESPECTROSCOPÍA NUCLEAR, VIBRACIONAL Y DE MEDIOS DESORDENADOS / NUCLEAR, VIBRATIONAL AND DISORDERED MEDIA SPECTROSCOPY

53. D. R. Abujetas, R. Paniagua-Domínguez, M. Nieto-Vesperinas, J. A. Sánchez-Gil.
Photonic band structure and effective medium properties of doubly-resonant core-shell metallo-dielectric nanowire arrays: low-loss, isotropic optical negative-index behavior.
Journal of Optics **17**, 12, 125104 (2015).

54. D. R. Abujetas, Diego R. Paniagua-Domínguez, J. A. Sánchez-Gil.
Unraveling the Janus Role of Mie Resonances and Leaky/Guided Modes in Semiconductor Nanowire Absorption for Enhanced Light Harvesting.
ACS Photonics **2**, 7, 921 (2015).
55. T. Alexander, Zs. Podolyak, M. L. Cortes, J. Gerl, D. Rudolph, L. G. Sarmiento, F. Ameil, T. Arici, D. Bazzacco, Ch. Bauer, M. A. Bentley, A. Blazhev, M. Bowry, P. Boutachkov, R. Carroll, C. Fahlander, A. Gadea, J. Gellanki, W. Gelletly, A. Givechev, N. Goel, P. Golubev, M. Gorska, A. Gottardo, E. Gregor, G. Guastalla, T. Habermann, M. Hackstein, A. Jungclaus, I. Kojouharov, W. Korten, S. Kumar, N. Kurz, N. Lalovic, M. Lettmann, C. Lizarazo, C. Louchart, S. Mandal, E. Merchan, C. Michelagnoli, Th. Moeller, K. Moschner, Z. Patel, N. Pietralla, S. Pietri, D. Ralet, M. Reese, P. H. Regan, P. Reiter, H. Schaffner, P. Singh, C. Stahl, R. Stegmann, O. Stezowski, J. Taprogge, P. Thoele, P. M. Walker, O. Wieland, A. Wendt, E. Wilson, R. Wood, and H. -J. Wollersheim.
Isomeric Ratios in Hg-206
Acta Physica Polonica B **46**, 3, 601 (2015).
56. H. Baba, R. Avigo, F.L. Bello Garrote, Blasi, A. Bracco, F. Camera, S. Ceruti, F.C.L. Crespi, de Angelis, G. Benzoni, A.I. Morales, H. Watanabe, S. Nishimura, L. Coraggio, Itaco, A. Gargano, F. Browne, R. Daido, P. Doornenbal, Y.H. Fang, G. Lorusso, Z. Patel, S. Rice, L. Sinclair, P.A. Söderström, T. Sumikama, Z.Y. Xu, R.G. Yokoyama, C. Delattre, Z. Dombradi, A. Gottardo, T. Isobe, I. Kuti, K. Matsui, B. Melon, D. Mengoni, T. Miyazaki, V. Modamio-Hoybjor, S. Momiyama, R. Napoli, M. Niikura, R. Orlandi, H. Sakurai, E. Sahin, D. Sohler, R. Taniuchi, J. Taprogge, Z. Vajta, J.J. Valiente-Dobón, O. Wieland, and M. Yalcinkaya.
Decay properties of ^{68,69,70}Mn: Probing collectivity up to N=44 in Fe isotopic chain
Physics Letters, Section B: Nuclear, Elementary Particle and High-Energy Physics, **751**, 17, 107 (2015)
57. B. Birkenbach, A. Vogt, K. Geibel, F. Recchia, P. Reiter, J. J. Valiente-Dobon, D. Bazzacco, M. Bowry, A. Bracco, B. Bruyneel, L. Corradi, F. C. L. Crespi, G. de Angelis, P. Desesquelles, J. Eberth, E. Farnea, E. Fioretto, A. Gadea, A. Gengelbach, A. Giaz, A. Gorgen, A. Gottardo, J. Grebosz, H. Hess, P. R. John, J. Jolie, D. S. Judson, A. Jungclaus, W. Korten, S. Lenzi, S. Leoni, S. Lunardi, R. Menegazzo, D. Mengoni, C. Michelagnoli, T. Mijatovic, G. Montagnoli, D. Montanari, D. Napoli, L. Pellegri, G. Pollarolo, A. Pullia, B. Quintana, F. Radeck, D. Rosso, E. Sahin, M. D. Salsac, F. Scarlassara, P. -A. Soderstrom, A. M. Stefanini, T. Steinbach, O. Stezowski, S. Szilner, B. Szpak, Ch. Theisen, C. Ur, V. Vandone, and A. Wiens.
Spectroscopy of the neutron-rich actinide nucleus U-240 following multinucleon-transfer reactions.
Physical Review C **92**, 4, 044319 (2015).
58. R. Boffy, M. Kreuz, J. Beaucour, U. Koester, and F. J. Bermejo.
Why neutron guides may end up breaking down? Some results on the macroscopic behaviour of alkali-borosilicate glass support plates under neutron irradiation.
Nuclear Instruments & Methods in Physics Research Section B **358**, 179 (2015).
59. F. Browne, A.M. Bruce, T. Sumikama, I. Nishizuka, S. Nishimura, P. Doornenbal, G. Lorusso, P.-A. Söderström, H. Watanabe, R. Daido, Z. Patel, S. Rice, L. Sinclair, J. Wu, Z.Y. Xu, A. Yagi, H. Baba, N. Chiga, R. Carroll, F. Didierjean, Y. Fang, N. Fukuda, G. Gey, E. Ideguchi, N. Inabe, T. Isobe, D. Kameda, I. Kojouharov, N. Kurz, T. Kubo, S. Lalkovski, Z. Li, R. Lozeva, H. Nishibata, A. Odahara, Zs. Podolyák, P.H. Regan, O.J. Roberts, H. Sakurai, H. Schaffner, G.S. Simpson, H. Suzuki, H. Takeda, M. Tanaka, J. Taprogge, V. Werner, and O. Wieland.
Lifetime measurements of the first 2⁺2⁺ states in ^{104,106}Zr: Evolution of ground-state deformations.
Physics Letters B **750**, 12, 448 (2015).
60. Browne, F., Bruce, A.M., Sumikama, T., Nishizuka, I., Nishimura, S., Doornenbal, P., Lorusso, G., Patel, Z., Rice, S., Sinclair, L., Söderström, P.-A., Watanabe, H., Wu, J., Xu, Z.Y., Baba, H., Chiga, N., Carroll, R., Daido, R., Didierjean, F., Fang, Y., Gey, G., Ideguchi, E., Inabe, N., Isobe, T., Kameda, D., Kojouharov, I., Kurz, N., Kubo, T., Lalkovski, S., Li, Z., Lozeva, R., Naoki, N., Nishibata, H., Odahara, A., Podolyák, Zs., Regan, P.H., Roberts, O.J., Sakurai, H., Schaffner, H., Simpson, G.S., Suzuki, H., Takeda, H., Tanaka, M., Taprogge, J., Werner, V., Wieland, and Yagi, A.
Gamma-Ray spectroscopy in the vicinity of Zr-108.
Acta Physica Polonica B **46**, 3, 721 (2015).

61. C. Cabrillo, F. Fdez.-Alonso, R. Fdez.-Perea, F.J. Bermejo, M.A. González, C. Mondelli and E. Farhi.
Crystallization of para-Hydrogen: a quantum phase transition at finite temperature?
Journal of Physics: Conference Series **663**, 012006 (2015).
62. M.V. Cañamares and J.R. Lombardi.
Raman, SERS, and DFT of Mauve Dye: Adsorption on Ag Nanoparticles.
Journal of Physical Chemistry C **119**, 25, 14297 (2015).
63. J. J. Camacho and L. Díaz.
Time and space-resolved spectroscopic and imaging study of a laser-produced swine muscle tissue plasma.
Journal of Physics: Conference Series **635**, 042005 (2015).
64. J. J. Camacho, L. Díaz, S. Martínez-Ramírez, and J. O. Cáceres.
Time- and space-resolved spectroscopic characterization of laser-induced swine muscle tissue plasma.
Spectrochimica Acta Part B: Atomic Spectroscopy **111**, 92 (2015).
65. M. Careche, P. Carmona, and I. Sánchez-Alonso.
*Monitoring the Time and Temperature History of Frozen Hake (*Merluccius merluccius*, L.) Muscle by FTIR Spectroscopy of the Lipid Fraction.*
Food and Bioprocess Technology **8**, 1, 112 (2015).
66. Carmona, P., López-Tobar, E., Molina, and M. Toledano.
About the vibrational spectroscopy in the diagnosis of Alzheimer's disease
Anales de la Real Academia Nacional de Farmacia **81**, 1, 19 (2015).
67. P. Carmona, M. Molina, E. López-Tobar, and A. Toledano.
Vibrational spectroscopic analysis of peripheral blood plasma of patients with Alzheimer's disease.
Analytical and Bioanalytical Chemistry **407**, 5, 7747 (2015).
68. S. Ceruti, F. Camera, A. Bracco, R. Avigo, G. Benzoni, N. Blasi, G. Bocchi, S. Bottoni, S. Brambilla, F. C. L. Crespi, A. Giaz, S. Leoni, A. Mentana, B. Million, A. I. Morales, R. Nicolini, L. Pellegrini, A. Pullia, S. Riboldi, O. Wieland, B. Birkenbach, D. Bazzacco, M. Ciemala, P. Desesquelles, J. Eberth, E. Farnea, A. Goergen, A. Gottardo, H. Hess, D. S. Judson, A. Jungclaus, M. Kmiecik, W. Korten, A. Maj, R. Menegazzo, D. Mengoni, C. Michelagnoli, V. Modamio, D. Montanari, S. Myalski, D. Napoli, B. Quintana, P. Reiter, F. Recchia, D. Rosso, E. Sahin, M. D. Salsac, P. -A. Soderstrom, O. Stezowski, Ch. Theisen, C. Ur, J. J. Valiente-Dobon, and M. Zieblinski.
Isospin Mixing in Zr-80: From Finite to Zero Temperature.
Physical Review Letters **115**, 22, 222502 (2015).
69. R. Chapman, A. Hodsdon, M. Bouhelal, F. Haas, X. Liang, F. Azaiez, Z. M. Wang, B. R. Behera, M. Burns, E. Caurier, L. Corradi, D. Curien, A. N. Deacon, Zs. Dombradi, E. Farnea, E. Fioretto, A. Gadea, F. Ibrahim, A. Jungclaus, K. Keyes, V. Kumar, S. Lunardi, N. Marginean, G. Montagnoli, D. R. Napoli, F. Nowacki, J. Ollier, D. O'Donnell, A. Papenberg, G. Pollarolo, M. -D. Salsac, F. Scarlassara, J. F. Smith, K. M. Spohr, M. Stanoiu, A. M. Stefanini, S. Szilner, M. Trotta, and D. Verney.
Spectroscopy of neutron-rich P-34,P-35,P-36,P-37,P-38 populated in binary grazing reactions.
Physical Review C **92**, 4, 044308 (2015).
70. Corsi, S. Boissinot, A. Obertelli, P. Doornenbal, M. Dupuis, F. Lechaftois, M. Matsushita, S. Peru, S. Takeuchi, H. Wang, N. Aoi, H. Baba, P. Bednarczyk, M. Ciemala, A. Gillibert, T. Isobe, A. Jungclaus, V. Lapoux, J. Lee, M. Martini, K. Matsui, T. Motobayashi, D. Nishimura, S. Ota, E. Pollacco, H. Sakurai, C. Santamaria, Y. Shiga, D. Sohler, D. Steppenbeck, and R. Taniuchi.
Neutron-driven collectivity in light tin isotopes: Proton inelastic scattering from Sn-104.
Physics Letters B **743**, 451 (2015).
71. F. C. L. Crespi, A. Bracco, R. Nicolini, E. G. Lanza, A. Vitturi, D. Mengoni, S. Leoni, G. Benzoni, N. Blasi, C. Boiano, S. Bottoni, S. Brambilla, F. Camera, A. Corsi, A. Giaz, B. Million, L. Pellegrini, V. Vandone, O. Wieland, P. Bednarczyk, M. Ciemala, M. Kmiecik, M. Krzysiek, A. Maj, D. Bazzacco, M. Bellato, B. Birkenbach, D. Bortolato, E. Calore, B. Cederwall, G. de Angelis, P. Desesquelles, J. Eberth, E. Farnea, A. Gadea, A. Goergen, A. Gottardo, H. Hess, R. Isocrate, J. Jolie, A. Jungclaus, R. S. Kempley, M. Labiche, R. Menegazzo, C. Michelagnoli, P. Molini, D. R. Napoli, A. Pullia, B. Quintana, F. Recchia, P. Reiter, E. Sahin, S. Siem, P. -A. Soederstroem, O. Stezowski, Ch. Theisen, C. Ur, and J. J. Valiente-Dobon.
1(-) and 2(+) discrete states in Zr-90 populated via the (O-17, O-17 'gamma) reaction.
Physical Review C **91**, 2, 024323 (2015).

72. M. Criado, S. Martínez-Ramírez, and J. M. Bastidas.
A Raman spectroscopy study of steel corrosion products in activated fly ash mortar containing chlorides.
Construction and Building Materials **96**, 383 (2015).
73. J.P. de Vicente, F. Sordo, J.M. Perlado, F.J. Bermejo, and F. Fernández-Alonso.
Guiding Criteria for Instrument Design at Long-pulse Neutron Sources.
Journal of Physics: Conference Series **663**, 012011 (2015).
74. F. Demmel, D. McPhail, J. Crawford, D. Maxwell, K. Pokhilchuk, V. Garcia-Sakai, S. Mukhopadyay, M. T. F. Telling, F. J. Bermejo, N. T. Skipper, and F. Fernandez-Alonso.
Opening the terahertz window on the OSIRIS spectrometer.
European Physical Journal: Web of Conferences **83**, 03003 (2015).
75. J. P. Fernández-García, M. Cubero, L. Acosta, M. Alcorta, M.A.G. Álvarez, M. J. G. Borge, L. Buchmann, C. A. Diget, H. A. Falou, B. Fulton, H.O.U. Fynbo, D. Galaviz, J. Gómez-Camacho, R. Kanungo, J. A. Lay, M. Madurga, I. Martel, A. M. Moro, I. Mukha, T. Nilsson, M. Rodríguez-Gallardo, A. M. Sánchez-Benítez, A. Shotter, O. Tengblad, and P. Walden.
Simultaneous analysis of the elastic scattering and breakup channel for the reaction Li-11+Pb-208 at energies near the Coulomb barrier.
Physical Review C **92**, 4, 044608 (2015).
76. J. P. Fernández-García, M. Cubero, L. Acosta, M. Alcorta, M. A. G. Álvarez, M. J. G. Borge, L. Buchmann, C. A. Diget, H. A. Falou, B. R. Fulton, H. O. U. Fynbo, D. Galaviz, J. Gómez-Camacho, R. Kanungo, J. A. Lay, M. Madurga, I. Martel, A. M. Moro, I. Mukha, T. Nilsson, M. Rodríguez-Gallardo, A. M. Sánchez-Benítez, A. Shotter, O. Tengblad, and P. Walden.
Li-11 structural information from inclusive break-up measurements.
EPJ Web of Conferences **88**, 01003 (2015).
77. DA. Fink, TE. Cocolios, AN. Andreyev, S. Antalic, AE. Barzakh, B. Bastin, Fedosseev, KT. Flanagan, L. Ghys, A. Gottberg, M. Huyse, N. Imai, T. Kron, N. Lecesne, KM. Lynch, BA. Marsh, D. Pauwels, E. Rapisarda, SD. Richter, RE. Rossel, S. Rothe, MD. Seliverstov, AM. Sjödin, C. P. Van Duppen, and K.D.A. Wendt.
In-Source Laser Spectroscopy with the Laser Ion Source and Trap: First Direct Study of the Ground-State Properties of Po-217,Po-219.
Physical Review X **5**, 011018 (2015).
78. D.A. Fink , S.D. Richter, K. Blaum, R. Catherall, B. Crepieux, V.N. Fedosseev, A. Gottberg, T. Kron, B.A. Marsh, C. Mattolat, S. Raeder, R.E. Rossel, S. Rothe, F. Schwellnus, M.D. Seliverstov, M. Sjödin, T. Stora, P. Suominen, and K.D.A. Wendt.
On-line implementation and first operation of the Laser Ion Source and Trap at ISOLDE/CERN.
Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms **344**, 1, 83 (2015).
79. L.N. Furini, S. Sánchez-Cortés, I. López-Tocón, J. C. Otero, R. F. Aroca, and C. J. L. Constantino.
Detection and Quantitative Analysis of Carbendazim Herbicide on Ag Nanoparticles Via Surface-Enhanced Raman Scattering.
Journal of Raman Spectroscopy **46**, 11, 1095 (2015).
80. M.J. García Borge
Recent highlights of the ISOLDE facility
11Th International Spring Seminar on Nuclear Physics: Shell Model and Nuclear Structure - achievements of the past two decades.
Journal of Physics Conference Series **580**, 012049 (2015).
81. R. García-Giménez, R. V. de la Villa, M. Frias, O. Rodríguez, S. Martínez-Ramírez, L. Fernández-Carrasco, I. S. de Soto, and E. Villar-Cocina.
Mineralogical study of calcined coal waste in a pozzolan/Ca(OH)(2) system.
Applied Clay Science **108**, 45 (2015).

82. García-Leis, A. Torreggiani, J. V. Vicente García-Ramos, and S. Sánchez-Cortés.
Hollow Au/Ag Nanostars Displaying Broad Plasmonic Resonance and High Surface-Enhanced Raman Sensitivity.
Nanoscale **7**, 32, 13629 (2015).
83. A. Garzón-Camacho, B. Fernández, M. A. G. Álvarez, and J. Ceballos
A Fast Readout Electronic System for Accurate Spatial Detection in Ion Beam Tracking for the Next Generation of Particle Accelerators.
IEEE Transactions on Instrumentation and Measurement, **64**, 2 (2015).
84. A. Illana, A. Perea, E. Nácher, R. Orlandi, and A. Jungclaus.
New reaction chamber for transient field g-factor measurements with radioactive ion beams.
Nuclear Instruments & Methods in Physics Research section A **785**, 47 (2015).
85. A. I. Krivchikov, G. A. Vdovichenko, O. A. Korolyuk, F. J. Bermejo, L. C. Pardo, J. L. Tamarit, A. Jezowski, and D. Szewczyk.
Effects of site-occupation disorder on the low-temperature thermal conductivity of molecular crystals.
Journal of Non-Crystalline Solids **407(1)**, 141 (2015).
86. J. Kubackova, G. Fabriciova, P. Miskovsky, D. Jancura, and S. Sanchez-Cortes.
Sensitive Surface-Enhanced Raman Spectroscopy (SERS) Detection of Organochlorine Pesticides by Alkyl Dithiol-Functionalized Metal Nanoparticles-Induced Plasmonic Hot Spots.
Analytical Chemistry **87**, 1, 663 (2015).
87. J. Litzinger, A. Blazhev, A. Dewald, F. Didierjean, G. Duchene, C. Fransen, G.R. Lozeva, K. Sieja, D. Verney, G. de Angelis, D. Bazzacco, B. Birkenbach, S. Bottoni, A. Bracco, T. Braunroth, B. Cederwall, L. Corradi, F. C. L Crespi, P. Desesquelles, J. Eberth, E. Ellinger, E. Farnea, E. Fioretto, R. Gernhaeuser, A. Goasduff, A. Goergen, A. Gottardo, J. Grebosz, M. Hackstein, H. Hess, F. Ibrahim, J. Jolie, A. Jungclaus, K. Kolos, W. Korten, S. Leoni, S. Lunardi, A. Maj, R. Menegazzo, D. Mengoni, C. Michelagnoli, T. Mijatovic, B. Million, O. Moeller, V. Modamio, G. Montagnoli, D. Montanari, A.I. Morales, D. R. Napoli, M. Niikura, G. Pollarolo, A. Pullia, B. Quintana, F. Recchia, P. Reiter, D. Rosso, E. Sahin, M. D.Salsac, F. Scarlassara, , P. -A. Soederstroem, A. M. Stefanini, O. Stezowski, S. Szilner, Ch. Theisen, J. J. Valiente Dobon, V. Vandone, and A.Vogt.
Transition probabilities in neutron-rich Se-84,Se-86.
Physical Review C **92**, 6, 064322 (2015).
88. López-Quintas, M. Oujja, M. Sanz, A. Benítez-Canete, R. J. Chater, M. V. Cañamares, J. F. Marco, and M. Castillejo.
Micrometric rods grown by nanosecond pulsed laser deposition of boron carbide.
Applied Surface Science **328**, 170 (2015).
89. E. López-Tobar, K. Hara, I. Izquierdo-Lorenzo, and S. Sánchez-Cortés.
Plasmonic Effects of Phenylenediacrylonitriles Linked at Interparticle Junctions of Metal Nanoparticles
Journal of Physical Chemistry C **119**, 1, 599 (2015).
90. E. López-Tobar, B. Hernández, J. Gómez, A. Chenal, J. V. García-Ramos, M. Ghomi, and S. Sánchez-Cortés.
Anchoring Sites of Fibrillogenic Peptide Hormone Somatostatin-14 on Plasmonic Nanoparticles.
Journal of Physical Chemistry C **119**, 15, 8273 (2015).
91. G. Lorusso, S. Nishimura, Z. Y. Xu, A. Jungclaus, Y. Shimizu, G. S. Simpson, P. -A. Soederstroem, H. Watanabe, F. Browne, P. Doornenbal, G. Gey, H. S. Jung, B. Meyer, T. Sumikama, J. Taprogge, Zs. Vajta, J. Wu, H. Baba, G. Benzoni, K. Y. Chae, F. C. L. Crespi, N. Fukuda, R. Gernhaeuser, N. Inabe, T. Isobe, T. Kajino, D. Kameda, G. D. Kim, Y. -K. Kim, I. Kojouharov, F. G. Kondev, T. Kubo, N. Kurz, Y. K. Kwon, G. J. Lane, Z. Li, A. Montaner-Piza, K. Moschner, F. Naqvi, M. Niikura, H. Nishibata, A. Odahara, R. Orlandi, Z. Patel, Zs. Podolyak, H. Sakurai, H. Schaffner, P. Schury, S. Shibagaki, K. Steiger, H. Suzuki, H. Takeda, A. Wendt, A. Yagi, and K. Yoshinaga.
Beta-Decay Half-Lives of 110 Neutron-Rich Nuclei across the N=82 Shell Gap: Implications for the Mechanism and Universality of the Astrophysical r Process.
Physical Review Letters **114**, 19, 192501 (2015).

92. M. V. Lund, M. J. G. Borge, J. A. Briz, J. Cederkall, H. O. U. Fynbo, J. H. Jensen, B. Jonson, K. L. Laursen, T. Nilsson, A. Perea, V. Pesudo, K. Riisager, and O. Tengblad.
Beta-delayed proton emission from Mg-21.
European Physical Journal A **51**, 9, 113 (2015).
93. M.V. Lund, M.J.G. Borge, J. A. Briz, J. Cederkall, HOU Fynbo, J.H. Jensen, B. Jonson, K.L. Laursen, T. Nilsson, A. Perea, V. Pesudo, K. Riisager, and O. Tengblad.
Systematic trends in beta-delayed particle emitting nuclei: The case of beta p alpha emission from Mg-21.
Physics Letters B **750**, 356 (2015).
94. J. Marganiec, F. Wamers, F. Aksouh, Yu. Aksyutina, H. Alvarez-Pol, T. Aumann, S. Beceiro-Novo, K. Boretzky, M. J. G. Borge, M. Chartier, A. Chatillon, L. V. Chulkov, D. Cortina-Gil, H. Emling, O. Ershova, L. M. Fraile, H. O. U. Fynbo, D. Galaviz, H. Geissel, M. Heil, D. H. H. Hoffmann, J. Hoffmann, H. T. Johansson, B. Jonson, C. Karagiannis, O. A. Kiselev, J. V. Kratz, R. Kulessa, N. Kurz, C. Langer, M. Lantz, T. Le Bleis, R. Lemmon, Yu. A. Litvinov, K. Mahata, C. Muentz, T. Nilsson, C. Nociforo, G. Nyman, W. Ott, V. Panin, S. Paschalidis, A. Perea, R. Plag, R. Reifarthe, A. Richter, C. Rodriguez-Tajes, D. Rossi, K. Riisager, D. Savran, G. Schrieder, H. Simon, J. Stroth, K. Suemmerer, O. Tengblad, H. Weick, M. Wiescher, C. Wimmer, and M. V. Zhukov.
Studies of continuum states in (16) Ne using three-body correlation techniques.
European Physical Journal A **51**, 1, 9 (2015).
95. K. Moschner, A. Blazhev, N. Warr, P. Boutachkov, P. Davies, R. Wadsworth, F. Ameil, H. Baba, T. Back, M. Dewald, P. Doornenbal, T. Faestermann, A. Gengelbach, J. Gerl, R. Gernhauser, S. Go, M. Gorska, H. Grawe, E. Gregor, H. Hotaka, T. Isobe, DG. Jenkins, J. Jolie, HS. Jung, I. Kojouharov, N. Kurz, M. Lewitowicz, G. Lorusso, E. Merchan, F. Nishibata, H. Nishibata, D. Nishimura, S. Nishimura, N. Pietralla, H. Schaffner, PA. Soderstroem, K. Steiger, T. Sumikama, J. Taprogge, P. Thole, H. Watanabe, V. Werner, ZY. Xu, A. Yagi, K. Yoshinaga, and Y. Zhu,
Study of ground and excited state decays in N approximate to Z Ag nuclei
Colección: EPJ Web of Conferences **93**, 01024 (2015).
96. E. Náher, M. Martensson, O. Tengblad, H. Álvarez-Pol, M. Bendel, D. Cortina-Gil, R. Gernhaeuser, T. Le Bleis, A. Maj, T. Nilsson, A. Perea, B. Pietras, G. Ribeiro, J.S. Sánchez del Río, J. Sánchez Rosado, A. Heinz, B. Szpak, M. Winkel, and M. Zieblinski.
Proton response of CEPA4: A novel LaBr₃(Ce)-LaCl₃(Ce) phoswich array for high-energy gamma and proton spectroscopy.
Nuclear Instruments & Methods in Physics Research A **769**, 105 (2015).
97. R. Orlandi, D. Mucher, R. Raabe, A. Jungclaus, S. D. Pain, V. Bildstein, R. Chapman, G. de Angelis, J. G. Johansen, P. Van Duppen, A. N. Andreyev, S. Bottoni, T. E. Cocolios, H. De Witte, J. Diriken, J. Elseviers, F. Flavigny, L. P. Gaffney, R. Gernhauser, A. Gottardo, M. Huyse, A. Illana, J. Konki, T. Kroll, R. Krucken, J. F. W. Lane, V. Liberati, B. Marsh, K. Nowak, F. Nowacki, J. Pakarinen, E. Rapisarda, F. Recchia, P. Reiter, T. Roger, E. Sahin, M. Seidlitz, K. Sieja, J. F. Smith, J. J. Valiente Dobon, M. Von Schmid, D. Voulot, N. Warr, F. K. Wenander, and K. Wimmer.
Single-neutron orbits near Ni-78: Spectroscopy of the N=49 isotope Zn-79.
Physics Letters B **740**, 298 (2015).
98. R. Paniagua-Domínguez, L. S. Froufe-Pérez, J. J. Sáenz, and J. A. Sánchez-Gil.
Localized magnetic plasmons in all-dielectric $\mu < 0$ metastructures.
Physical Review B **91**, 23, 235120 (2015).
99. M. Pfuetzner, W. Dominik, Z. Janas, C. Mazzocchi, M. Pomorski, A. A. Bezbakh, M. J. G. Borge, K. Chrapkiewicz, V. Chudoba, R. Frederickx, G. Kaminski, M. Kowalska, S. Krupko, M. Kuich, J. Kurcewicz, A. A. Lis, M. V. Lund, K. Miernik, J. Perkowski, R. Raabe, G. Randisi, K. Riisager, S. Sambi, O. Tengblad, and F. Wenander.
 β decay of He6 into the $\alpha+d$ continuum
Physical Review C **92**, 1, 014316 (2015).
100. T. Pintado, C. Ruiz-Capillas, F. Jiménez-Colmenero, P. Carmona, and A. M. Herrero.
*Oil-in-water emulsion gels stabilized with chia (*Salvia hispanica L.*) and cold gelling agents: Technological and infrared spectroscopic characterization.*
Food Chemistry **185**, 470 (2015).

101. Reyman Dolores, Serrano Raquel, and García-Leis Adianez.
Sonochemical synthesis of iron oxide nanoparticles loaded with folate and cisplatin: Effect of ultrasonic frequency.
Ultrasonics Sonochemistry **23**, 391 (2015).
102. G. Ribeiro, and O. Tengblad.
Study of the Unbound Be-13 Resonance in a (p, 2p) Reaction at GSI.
Acta Physica Polonica B **46**, 3, 547 (2015).
103. G. Ribeiro, M. Martensson, and A. Perea.
An idea for the future proton detection of (p,2p) reactions with the (RB)-B-3 set-up at FAIR.
Journal of Physics Conference Series **599**, 012034 (2015).
104. M. L. Ruiz del Castillo, E. López-Tobar, S. Sánchez-Cortés, G. Flores, G. P. Blanch.
Stabilization of curcumin against photodegradation by encapsulation in gamma-cyclodextrin: A study based on chromatographic and spectroscopic (Raman and UV-visible) data.
Vibrational Spectroscopy **81**, 106 (2015).
105. I. F. Sáez del Bosque, S. Martínez-Ramírez, M. T. Blanco-Varela.
Calorimetric study of the early stages of the nanosilica - tricalcium silicate hydration. Effect of temperature.
Materiales de Construcción **65**, 320 (2015).
106. E. Sahin, M. Doncel, K. Sieja, G. de Angelis, A. Gadea, B. Quintana, A. Gorgen, V. Modamio, D. Mengoni, J. J. Valiente-Dobon, P. R. John, M. Albers, D. Bazzacco, G. Benzoni, B. Birkenbach, B. Cederwall, E. Clement, D. Curien, L. Corradi, P. Desesquelles, A. Dewald, F. Didierjean, G. Duchene, J. Eberth, M. N. Erduran, E. Farnea, E. Fioretto, G. de France, C. Fransen, R. Gernhaeuser, A. Gottardo, M. Hackstein, T. Hagen, A. Hernandez-Prieto, H. Hess, T. Hueyuek, A. Jungclaus, S. Klupp, W. Korten, A. Kusoglu, S. M. Lenzi, J. Ljungvall, C. Louchart, S. Lunardi, R. Menegazzo, C. Michelagnoli, T. Mijatovic, B. Million, P. Molini, G. Montagnoli, D. Montanari, O. Moeller, D. Napoli, A. Obertelli, R. Orlandi, G. Pollaro, A. Pullia, F. Recchia, P. Reiter, D. Rosso, W. Rother, M. -D. Salsac, F. Scarlascara, M. Schlarb, S. Siem, P. P. Singh, P. -A. Soderstrom, A. M. Stefanini, O. Stezowski, B. Sulignano, S. Szilner, Ch. Theisen, C. A. Ur, and M. Yalcinkaya.
Shell evolution beyond N=40: Cu-69,Cu-71,Cu-73.
Physical Review C **91**, 3, 034302 (2015).
107. S. Sambi, R. Raabe, M. J. G. Borge, M. Caamano, S. Damoy, B. Fernández-Domínguez, F. Flavigny, H. Fynbo, J. Gibelin, G. F. Grinyer, A. Heinz, B. Jonson, M. Khodery, T. Nilsson, R. Orlandi, J. Pancin, D. Perez-Loureiro, G. Randisi, G. Ribeiro, T. Roger, D. Suzuki, O. Tengblad, R. Thies, U. Datta.
C-12+p resonant elastic scattering in the Maya active target.
European Physical Journal A **51**, 2, 25 (2015).
108. M. Sanz, M. Oujja, C. Ascaso, A. de los Ríos, S. Pérez-Ortega, V. Souza-Egipsy, J. Wierzchos, M. Speranza, M. V. Cañamares, M. Castillejo.
Infrared and ultraviolet laser removal of crustose lichens on dolomite heritage stone.
Applied Surface Science **346**, 248 (2015).
109. P.A. Soderstrom, S. Nishimura, ZY Xu, K. Sieja, V. Werner, P. Doornenbal, G. Lorusso, F. Browne, G. Gey, HS. Jung, T. Sumikama, J. Taprogge, Z. Vajta, H. Watanabe, J. Wu, J. H. Baba, Z. Dombradi, S. Franchoo, T. Isobe, PR. John, YK. Kim, I. Kojouharov, N. Kurz, YK. Kwon, Z. Li, I. Matea, K. Matsui, G. Martinez-Pinedo, D. Mengoni, P. Morfouace, DR. Napoli, M. Niikura, A. Odahara, K. Ogawa, N. Pietralla, E. Sahin, H. Sakurai, H. Schaffner, D. Sohler, IG. Stefan, D. Suzuki, R. Taniuchi, A. Yagi, and K. Yoshinaga.
Two-hole structure outside Ni-78: Existence of a mu s isomer of Co-76 and beta decay into Ni-76.
Physical Review C **92**, 5 (2015).
110. C. Stahl, J. Leske, C. Bauer, D. Bazzacco, E. Farnea, A. Gottardo, P. R. John, C. Michelagnoli, N. Pietralla, M. Reese, E. Sahin, B. Birkenbach, A. Bracco, F. C. L. Crespi, G. de Angelis, P. Desesquelles, J. Eberth, A. Gadea, A. Goergen, J. Grebosz, H. Hess, J. Jolie, A. Jungclaus, W. Korten, S. M. Lenzi, S. Lunardi, R. Menegazzo, D. Mengoni, V. Modamio, D. R. Napoli, A. Pullia, B. Quintana, F. Recchia, P. Reiter, D. Rosso, M. D. Salsac, P. -A. Soderstrom, O. Stezowski, Ch. Theisen, C. A. Ur, and J. J. Valiente-Dobon.
Population of the 2(ms)(+) mixed-symmetry state of Ba-140 with the alpha-transfer reaction.
Physical Review C **92**, 4, 044324 (2015).

111. D. Szewczyk, A. Jezowski, G. A. Vdovichenko, A. I. Krivchikov, F. J. Bermejo, J. L. Tamarit, L. C. Pardo, and J. W. Taylor.
Glassy Dynamics versus Thermodynamics: The Case of 2-Adamantanone.
Journal of Physical Chemistry B **119**, 26, 8468 (2015).
112. J. Taprogge, A. Jungclaus, H. Grawe, S. Nishimura, P. Doornenbal, G. Lorusso, G. S. Simpson, P. A. Soederstroem, T. Sumikama, Z. Y. Xu, H. Baba, F. Browne, N. Fukuda, R. Gernhaeuser, G. Gey, N. Inabe, T. Isobe, H. S. Jung, D. Kameda, G. D. Kim, Y. -K. Kim, I. Kojouharov, T. Kubo, N. Kurz, Y. K. Kwon, Z. Li, H. Sakurai, H. Schaffner, K. Steiger, H. Suzuki, H. Takeda, Zs. Vajta, H. Watanabe, J. Wu, A. Yagi, K. Yoshinaga, G. Benzoni, S. Boenig, K. Y. Chae, L. Coraggio, A. Covello, J. -M. Daugas, F. Drouet, A. Gadea, A. Gargano, S. Ilieva, F. G. Kondev, T. Kroell, G. J. Lane, A. Montaner-Piza, K. Moschner, D. Mucher, F. Naqvi, M. Niikura, H. Nishibata, A. Odahara, R. Orlandi, Z. Patel, Zs. Podolyak, and A. Wendt.
Beta decay of Cd-129 and excited states in In-129
Physical Review C **91**, 5, 054324 (2015).
113. D. van Dam, D.R. Abujetas, R. Paniagua-Domínguez, J. A. Sánchez-Gil, Erik P.A.M. Bakkers, J.E.M. Haverkort, and J.G. Rivas.
Directional and Polarized Emission from Nanowire Arrays.
Nano Letters **15**, 7, 4557 (2015).
114. G. A. Vdovichenko, A. I. Krivchikov, O. A. Korolyuk, J. L. Tamarit, L. C. Pardo, M. Rovira-Esteve, F. J. Bermejo, M. Hassaine, and M. A. Ramos.
Thermal properties of halogen-ethane glassy crystals: Effects of orientational disorder and the role of internal molecular degrees of freedom.
Journal of Chemical Physics **143**, 8, 084510 (2015).
115. A. Vogt, B. Birkenbach, P. Reiter, L. Corradi, T. Mijatovic, D. Montanari, S. Szilner, D. Bazzacco, M. Bowry, A. Bracco, B. Bruyneel, F. C. L. Crespi, G. de Angelis, P. Desesquelles, J. Eberth, E. Farnea, E. Fioretto, A. Gadea, K. Geibel, A. Gengelbach, A. Giaz, A. Gorgen, A. Gottardo, J. Grebosz, H. Hess, P. R. John, J. Jolie, D.S. Judson, A. Jungclaus, W. Korten, S. Leoni, S. Lunardi, R. Menegazzo, D. Mengoni, C. Michelagnoli, G. Montagnoli, D. Napoli, L. Pellegrini, G. Pollarolo, A. Pullia, B. Quintana, F. Radeck, F. Recchia, D. Rosso, E. Sahin, M. D. Salsac, F. Scarlassara, P-A. Soderstrom, A. Stefanini, T. Steinbach, O. Stezowski, B. Szpak, Ch. Theisen, C. Ur, J. J. Valiente-Dobon, V. Vandone, and A. Wiens.
Light and heavy transfer products in Xe-136+U-238 multinucleon transfer reactions.
Physical Review C **92**, 2, 024619 (2015).
116. A. Wendt, J. Taprogge, P. Reiter, P. Golubev, H. Grawe, S. Pietri, P. Boutachkov, A. Algora, F. Ameil, M. A. Bentley, A. Blazhev, D. Bloor, B. S. Nara Singh, M. Bowry, A. Bracco, N. Braun, F. Camera, J. Cederkaell, F. Crespi, A. de la Salle, D. DiJulio, P. Doornenbal, K. Geibel, J. Gellanki, J. Gerl, J. Grebosz, G. Guastalla, T. Habermann, M. Hackstein, R. Hoischen, A. Jungclaus, E. Merchan, B. Million, A. Morales, K. Moschner, Zs. Podolyak, N. Pietralla, D. Ralet, M. Reese, D. Rudolph, L. Scruton, B. Siebeck, N. Warr, O. Wieland, and H. J. Wollersheim.
Publisher's Note: Isospin symmetry in the sd shell: Transition strengths in the neutron-deficient sd shell nucleus Ar-33 (vol 90, 054301, 2014).
Physical Review C **91**, 1, 019904 (2015).

PUBLICACIONES CONJUNTAS CON EL DPTO. DE OFT / PUBLICATIONS IN COMMON WITH THE OFT DEPARTMENT

- J. A. Briz, E. Nácher, M.J.G. Borge, A. Algora, B. Rubio, Ph. Dessagne, A. Maira, D. Cano-Ott, S. Courtin, D. Escrig, L.M. Fraile, W. Gelletly, A. Jungclaus, G. Le Scornet, F. Marechal, Ch. Miehe, E. Poirier, A. Poves, P. Sarriuguren, J.L. Tain, O. Tengblad.
Shape study of the N = Z nucleus Kr-72 via beta decay.
Physical Review C **92**, 5, 054326 (2015).
- M.E. Estévez Aguado, A. Algora, Jo. Agramunt, B. Rubio, J.L. Tain, D. Jordan, L. M. Fraile, W. Gelletly, A. Frank, M. Csatlos, L. Csige, Zs. Dombradi, A. Krasznahorkay, E. Nácher, P. Sarriuguren, M.J.G. Borge, J. A. Briz, O. Tengblad, F. Molina, O. Moreno, M. Kowalska, V.N. Fedossev, B.A. Marsh, D. V. Fedorov, P.L. Molkanov, A. N. Andreyev, M. D. Seliverstov, and K. Burkard, W. Hüller.
Shapes of Pb-192,Pb-190 ground states from beta-decay studies using the total-absorption technique.
Physical Review C **92**, 4, 044321 (2015).

PUBLICACIONES CONJUNTAS CON EL DPTO. DE FMM / PUBLICATIONS IN COMMON WITH THE FMM DEPARTMENT

117. Rodríguez-Rodríguez, E. Rebollar, M. Soccio, T. A. Ezquerra, D. R. Rueda, J.V. García-Ramos, M. Castillejo, and M.C. García-Gutiérrez.
Laser-Induced Periodic Surface Structures on Conjugated Polymers: Poly(3-hexylthiophene).
Macromolecules **48**, 4014 (2015).

6.1.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS

118. J. Aldeguende, P. G. Jambrina, L. Gónzalez-Sánchez, V. J. Herrero and F. J. Aoiz.
Influence of the Reactants Rotational Excitation on the H + D₂(v=0, j) Reactivity.
Journal of Physical Chemistry A, **119**, 12245 (2015).
119. Jean-Baptiste Bossa, Belén Maté, Coen Fransen, Stéphanie Cazaux, Sergio Pilling, Will Robson Monteiro Rocha, Juan Ortigoso and Harold Linnartz.
Porosity and band- strength measurements of multi-phase composite ices.
Astrophysical Journal **814**, 47 (2015).
120. D. Fernández-Torre, A. Yurtsever, J. Onoda, M. Abe, S. Morita, Y. Sugimoto, and R. Pérez.
Pt atoms adsorbed on TiO₂(110)-(1 x 1) studied with noncontact atomic force microscopy and first-principles simulations.
Physical Review B **91**, 075401 (2015).
121. O. Gálvez, M.T. Baeza-Romero, Mikel Sanz, and A. Saiz-López.
Photolysis of frozen iodate salts as a source of active iodine in the polar environment.
Atmospheric Chemistry and Physics Discussions **15**, 27917 (2015).
Doi:10.5194/acpd-15-27917-2015.
122. M. I. Hernández, J. M. Fernández, G. Tejeda, E. Moreno, and S. Montero.
Broadening of H₂O rotational lines by collisions with he atoms at low temperature
Astrophysical Journal **808**, 175 (2015).
123. M. Jiménez-Redondo, E. Carrasco, V. J. Herrero, and I. Tanarro.
Chemistry in glow discharges of H₂/O₂ mixtures. Diagnostics and modelling.
Plasma Sources Science and Technology **24**, 015029 (2015).
124. M. Kühnel, J. M. Fernández, F. Tramonto, G. Tejeda, E. Moreno, A. Kalinin, M. Nava, D. E. Galli, S. Montero, and R. E. Grisenti.
Mixing Effects in the Crystallization of Supercooled Quantum Binary Liquid
Journal of Chemical Physics **143**, 064504 (2015).
125. D. Lisak, A. Cygan, D. Bermejo, J.L. Domenech, J.T. Hodges, and H. Tran.
Application of the Hartmann-Tran profile to analysis of H₂O spectra.
Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer **164**, 221 (2015).
126. G. Di Lonardo, L. Fusina, E. Canè, F. Tamassia, R. Z. Martínez, and D. Bermejo.
High resolution infrared and Raman spectra of ¹³C¹²CD₂: The CD stretching fundamentals and associated combination and hot bands.
Chemical Physics **143**, 094302 (2015).
127. R. Martín-Doménech, J. Manzano-Santamaría, G. M. Muñoz Caro, G. A. Cruz-Díaz, Y. J. Chen, V. J. Herrero, and I. Tanarro.
UV photoprocessing of CO₂ ice: A complete quantification of photochemistry and photon-induced desorption processes.
Astronomy & Astrophysics **584**, A14 (2015).
128. R. Z. Martínez and D. Bermejo.
Experimental determination of the rate of V-V collisional relaxation in ¹⁴N₂ in its ground (X1Σg⁺) electronic state between 77 and 300 K.
Physical Chemistry Chemical Physics **17**, 12661 (2015).

129. B. Maté, I. Tanarro, R. Escribano, M. A. Moreno, and V. J. Herrero.
Stability of extraterrestrial glycine under energetic particle radiation estimated from 2 keV electron bombardment experiments.
Astrophysical Journal **806**, 151 (2015).
130. M. Schmidt, J. M. Fernández, N. Faruk, M. Nooijen, R. J. Le Roy, J. H. Morilla, G. Tejeda, S. Montero, and P. N. Roy.
Raman Vibrational Shifts of Small Clusters of Hydrogen Isotopologues.
Journal of Physical Chemistry A **119**, 12551 (2015).
131. G. Tejeda, E. Carmona-Novillo, E. Moreno, J. M. Fernández, M. I. Hernández and S. Montero.
Laboratory study of rate coefficients for H₂O:He inelastic collisions between 20 and 120 K.
Astrophysical Journal Supplement Series **216**(1), 3 (2015).
132. V. Timón, O. Gálvez, B. Maté, I. Tanarro, V. J. Herrero, and R. Escribano.
Theoretical model of the interaction of glycine with hydrogenated amorphous carbón (HAC).
Physical Chemistry Chemical Physics **17**, 28966 (2015).

PUBLICACIONES CONJUNTAS CON EL DPTO. DE QFT / PUBLICATIONS IN COMMON WITH THE QFT DEPARTMENT

- S. Dalbouha, M. Prakash, V. Timón, N. Komiha, M. Hochlaf, and M. L. Senent.
Explicitly correlated interaction potential energy profile of imidazole + CO₂ complex.
Theoretical Chemistry Accounts, **134**, 63 (2015).
- V. Timón, M. L. Senent and M. Hochlaf.
Structural single and multiple molecular adsorption of CO₂ and H₂O in zeolitic imidazolate framework (ZIF) crystals.
Microporous and Mesoporous Materials **218**, 33 (2015).

6.1.4 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

133. F.Z. Benabid, L. Rong, D. Benachour, M.E. Cagiao, F. Zouai, S. Bouhelal, and F.J. Baltá Calleja.
Nanostructural Characterization of Poly (Vinylidene Fluoride)-Clay Nanocomposites prepared by Reactive Extrusion.
Journal Polymer of Engineering **35**(2), 181 (2015).
134. S.Chaibi, D. Benachour, M. Merbah, M. E. Cagiao, and F. J. Baltá Calleja.
The role of crosslinking on the physical properties of gelatin based films.
Colloid & Polymer Science **293**, 2741 (2015).
135. A. M. Díez-Pascual, M. A. Gómez-Fatou, F. Ania, and A. Flores.
Nanoindentation in polymer nanocomposites.
Progress Materials Science **67**, 1 (2015).
136. A. Flores, H. J. Salavagione, F. Ania, G. Martínez, G. Ellis, and M. A. Gómez-Fatou.
The overlooked role of reduced graphene oxide in the reinforcement of hydrophilic polymers.
Journal of Materials Chemistry C **3**, 1177 (2015).
137. R. Hernández, M. Criado, A. Nogales, M. Sprung, C. Mijangos, and T. A. Ezquerra.
Deswelling Of Poly (N-Isopropylacrylamide) Derived Hydrogels And Their Nanocomposites With Iron Oxide Nanoparticles As Revealed By X-Ray Photon Correlation Spectroscopy.
Macromolecules **48**(2), 393 (2015).
138. J. Hernández-Rueda, N. Götte, Jan Siegel, M. Soccio, Ba Zielinski, C. Sarpe, M. Wollenhaupt, T. A. Ezquerra, and T. Baumert, and J. Solís.
Nanofabrication of tailored surface structures in dielectrics using temporally shaped fs-laser pulses
ACS Applied Materials and Interfaces **7**(12), 6613 (2015).

139. M. Hernández, J. L. Valentín, M. A. López-Manchado, and T. A. Ezquerra.
Influence of the vulcanization system on the dynamics and structure of natural rubber: comparative study by means of broadband dielectric spectroscopy and solid-state NMR spectroscopy.
European Polymer Journal **68**, 90 (2015).
140. J. Maiz, M. Muñoz Rojo, B. Abad, A. A. Wilson, A. Nogales, D. A. Borca-Tasciuc, T. Borca-Tasciuc, and M. Martín-González.
Enhancement of thermoelectric efficiency of doped PCDTBT polymer films.
RSC Advances **5**(82), 66687 (2015).
141. I. Martín-Fabiani, E. Rebollar, M. C. García-Gutiérrez, D. R. Rueda, M. Castillejo and T. A. Ezquerra.
Mapping the Structural Order of Laser Induced Periodic Surface Structures in Thin Polymer Films by Microfocus Beam Grazing Incidence Small Angle X-Ray Scattering.
ACS Applied Materials and Interfaces **7**(5), 3162 (2015).
142. D. Martínez-Tong, A. Rodríguez-Rodríguez, A. Nogales, M. C. García-Gutiérrez, F. Pérez-Murano, J. Llobet, T. A. Ezquerra, and E. Rebollar.
Laser Fabrication of Polymer Ferroelectric Nanostructures for Non-volatile Organic Memory Devices.
ACS Applied Materials Interfaces **7**(35), 19611 (2015).
143. D. Martínez-Tong, M. Soccio, A. Sanz, C. García, T. A. Ezquerra, and A. Nogales.
Ferroelectricity and molecular dynamics of poly(vinylidenefluoride-trifluoroethylene) nanoparticles.
Polymer **56**(1), 428 (2015).
144. K. Moorthi, K. Kamio, J. Ramos, and D. N. Theodorou.
Monte Carlo simulations of structure and entanglements in polymer melts
Molecular Simulation **41**(10-12), 993 (2015).
145. S. Paszkiewicz, A. Szymczyk, X.M. Sui, H.D. Wagner, A. Linares, T. A. Ezquerra and Z. Roslaniec.
Synergetic effect of single-walled carbon nanotubes (SWCNT) and graphene nanoplatelets (GNP) in electrically conductive PTT-block-PTMO hybrid nanocomposites prepared by in situ polymerization.
Composites Science and Technology **118**, 72 (2015).
146. J. Ramos, J. F. Vega, and J. Martínez-Salazar.
Molecular Dynamics Simulations for the Description of Experimental Molecular Conformation, Melt Dynamics, and Phase Transitions in Polyethylene
Macromolecules **48**(14), 5016 (2015).
147. E. Rebollar, M. Castillejo, and T. A. Ezquerra.
Laser induced periodic surface structures on polymer films: From fundamentals to applications.
European Polymer Journal **73**, 162 (2015).
148. E. Rebollar, M. Hernández, M. Sanz, S. Pérez, T. A. Ezquerra, and M. Castillejo.
Laser-induced surface structures on gold-coated polymers: influence of morphology on surface-enhanced Raman scattering enhancement.
Journal of Applied Polymer Science **132**(45), 42770 (2015).
149. E. Rebollar, D. R. Rueda, I. Martín-Fabiani, A. Rodríguez-Rodríguez, M. C. García-Gutiérrez, G. Portale, M. Castillejo, and T. A. Ezquerra.
In Situ Monitoring of Laser-Induced Periodic Surface Structures Formation on Polymer Films by Grazing Incidence Small-Angle X-ray Scattering.
Langmuir **31**(13), 3973 (2015).
150. A. Rodríguez-Rodríguez, M. Soccio, D. E. Martínez-Tong, T. A. Ezquerra, B. Watts, and M. C. García-Gutiérrez.
Competition between Phase Separation and Structure Confinement in P3HT/PCDTBT Heterojunctions: Influence on Nanoscale Charge Transport.
Polymer **77**, 70 (2015).
151. A. Sanz, T. A. Ezquerra, R. Hernández, M. Sprung, and A. Nogales.
Relaxation processes in a Lower Disorder Order Transition diblock copolymer.
Journal of Chemical Physics **142**(6), 064904 (2015).

152. M. Soccio, D. R. Rueda, M. C. García-Gutiérrez, N. Alayo, F. Pérez-Murano, N. Lotti, A. Munari, and T. A. Ezquerra.
Morphology of Poly(propylene azelate) gratings prepared by Nanoimprint Lithography as revealed by Atomic Force Microscopy and Grazing Incidence X-ray Scattering Polymer.
Polymer **61**(1), 61 (2015).
153. J. Spièce, D.E. Martínez-Tong, M. Sferrazza, A. Nogales, and S. Napolitano.
Are polymers glassier upon confinement?
Soft Matter **11**(31), 6179 (2015).
154. J.F. Vega, N. Jargour, R. Núñez-Ramírez, G. Liu, D. Wang, M. Trujillo, A.J. Müller and J. Martínez-Salazar.
The influence of short chain branching on the morphology and structure of polyethylene single crystals
Journal of Polymer Science: Polymer Physics **53**(24), 1751 (2015).
155. E. Vicente-Alique, J.F. Vega, N. Robledo, J. Nieto, and J. Martínez-Salazar.
Study of the effect of the molecular architecture of the components in the melt rheological properties of LLDPE/LDPE blends.
Journal of Polymer Research **22**(4), 62 (2015).

PUBLICACIONES CONJUNTAS CON EL DPTO. DE ENVYMED / PUBLICATIONS IN COMMON WITH ENVYMED DEPARTMENT

- A. Rodríguez-Rodríguez, E. Rebollar, M. Soccio, T. A. Ezquerra, D. R. Rueda, J. V. García-Ramos, M. Castillejo, and M. C. García-Gutiérrez.
Laser-Induced Periodic Surface Structures on Conjugated Polymers: Poly(3-hexylthiophene).
Macromolecules **48** (12), 4024 (2015).

6.2 PUBLICACIONES EN REVISTAS NO JCR/ISI / NON JCR-ISI PUBLICATIONS

6.2.1 DPTO. DE QUÍMICA Y FÍSICA TEÓRICAS / THEORETICAL PHYSICS AND CHEMISTRY

1. M.K. Gaidarov, A.N. Antonov, P. Sarriguren, and E. Moya de Guerra.
Symmetry energy and structure of exotic nuclei.
Bulgarian Journal of Physics **42**, 143 (2015).
 ISSN: 1310-0157
2. M.K. Gaidarov, A.N. Antonov, D.N. Kadrev, P. Sarriguren, and E. Moya de Guerra
Temperature dependence of the symmetry energy in finite nuclei.
Proceedings of the 34th International Workshop on Nuclear Theory **34**, 62 (2015).
 ISSN: 1313-2822

6.2.2 DPTO. DE ESPECTROSCOPIA NUCLEAR, VIBRACIONAL Y DE MEDIOS DESORDENADOS / NUCLEAR, VIBRATIONAL AND DISORDERED MEDIA SPECTROSCOPY

3. R. Fernández Perea, C. Cabrillo, S. Mukhopadhyay, F. Fernández-Alonso, and F. J. Bermejo.
Towards a better modelisation of carbon-based nanomaterials.
RAL Technical Report, RAL-TR-2015-003, 254 (2015).
[\(https://epubs.stfc.ac.uk/work/17801114\)](https://epubs.stfc.ac.uk/work/17801114)
4. J.L. García Pomar and R. Gutiérrez Contreras
Red fluorescence of chlorophyll Fluorescencia roja de la clorofila
Óptica Pura y Aplicada **48**, 2, 93 (2015).

5. R. Rodríguez-Oliveros, D. Macías, R. Paniagua-Domínguez, and J. A. Sánchez-Gil.
Plasmon spectroscopy: Theoretical and numerical calculations, and optimization techniques.
Nanospectroscopy **1**, 67 (2015).
6. I. F. Sáez Del Bosque, M. T. Blanco-Varela, S. Martínez-Ramírez, and M. Martín Pastor.
Análisis de materiales cementantes por 29Si MAS RMN.
Cemento y Hormigón **966**, 16 (2015).

6.3 LIBROS, MONOGRAFÍAS Y OTRAS PUBLICACIONES DE PROCEEDINGS / BOOKS, PROCEEDINGS AND OTHER PUBLICATIONS

6.3.1 DPTO. DE QUÍMICA Y FÍSICA TEÓRICAS / THEORETICAL PHYSICS AND CHEMISTRY

1. F. Barbero and E. J. S. Villaseñor.
The Thermodynamic Limit for Black Holes in Loop Quantum Gravity
Proceedings of the 13th Marcel Grossmann Meeting on General Relativity, p. 2263-2265, editores K. Rosquist, R.T. Jantzen, y R. Ruffini (World Scientific, Singapore, 2015).
ISBN: 978-981-4612-14-2
2. J. Cortez, D. Martín-de Blas, G. A. Mena Marugán, and J. M. Velhinho.
Quantization of the Massless Scalar Field in de Sitter Spacetime with Unitary Dynamics.
Proceedings of the 13th Marcel Grossmann Meeting on General Relativity, p. 1637-1639, editores K. Rosquist, R.T. Jantzen, y R. Ruffini (World Scientific, Singapore, 2015).
ISBN: 978-981-4612-14-2
3. M. Fernández-Méndez, G. A. Mena Marugán, and J. Olmedo.
Hybrid Quantization of an Inhomogeneous Inflationary Scenario.
Proceedings of the 13th Marcel Grossmann Meeting on General Relativity, p. 2275-2277, editores K. Rosquist, R.T. Jantzen, y R. Ruffini (World Scientific, Singapore, 2015).
ISBN: 978-981-4612-14-2
4. D. Martín-de Blas, M. Martín-Benito, and G. A. Mena Marugán.
Approximate Quantum Solutions in Inhomogeneous Loop Quantum Cosmology.
Proceedings of the 13th Marcel Grossmann Meeting on General Relativity, p. 2278-2280 , editores K. Rosquist, R.T. Jantzen, y R. Ruffini (World Scientific, Singapore, 2015).
ISBN: 978-981-4612-14-2
5. J. M. Velhinho, J. Olmedo, G. A. Mena Marugán, and J. Cortez.
Unitary Evolution as a Uniqueness Criterion.
Proceedings of the 13th Marcel Grossmann Meeting on General Relativity, p. 2272-2274, editores K. Rosquist, R.T. Jantzen, y R. Ruffini (World Scientific, Singapore, 2015).
ISBN: 978-981-4612-14-2

6.3.2 DPTO. DE ESPECTROSCOPÍA NUCLEAR, VIBRACIONAL Y DE MEDIOS DESORDENADOS / NUCLEAR, VIBRATIONAL AND DISORDERED MEDIA SPECTROSCOPY

6. A. M. Herrero, P. Carmona, F. Jiménez-Colmenero, and C. Ruiz-Capillas.
Application of vibrational spectroscopy to elucidate protein conformational changes promoted by thermal treatment in muscle based food.
Chapter 19 in: Reactions and Mechanisms in Thermal Analysis of Advanced Materials. Atul Tiwari, Baldev Raj (Eds.), John Wiley (New Jersey), 2015.
ISBN: 978-1-119-11757-5.
(publicación conjunta ICTAN-CSIC and IEM-CSIC)
7. P. M. Carmona-Quiroga, M. T. Blanco-Varela, and S. Martínez-Ramírez.
Freeze-thaw and UV resistance in building stone coated with two permanent anti-graffiti treatments.
Engineering Geology for Society and Territory 8, p. 531-534.

Springer International Publishing, Switzerland 2015.
 ISBN: 978-3-319-09407-6 (Print)
 ISBN: 978-3-319-09408-3 (Online).

8. T. Palomar, M. Oujja, I. Llorente, B. Ramírez Barat, M.V. Cañamares, M. Castillejo, and E. Cano. *Estudio del efecto de la limpieza láser en plata sulfurada.* Chapter in: Estudio y Conservación del Patrimonio Cultural. Actas. p. 94-97
 Ed. Red de Ciencia y Tecnología para la Conservación del Patrimonio Cultural (España.), 2015.
 ISBN: 978-84-608-2452-7. *Publicación conjunta CENIM, IQFR, and IEM (CSIC).*

6.3.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS

9. D. Fernández Torre y B. Maté Naya.
“Luz y Atmósfera”.
 Capítulo 7 del libro: La luz: ciencia y tecnología.
 Colección divulgación. Editorial CSIC y Los Libros de la Catarata. Madrid (2015).
 ISBN: 978-84-00-09922-0.

6.3.4 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

10. D. Martínez-Tong, A. Sanz, J. Martín, T. A. Ezquerra, A. Nogales
Non-equilibrium structure affects ferroelectric behavior of confined polymers.
 Chapter in: Non-equilibrium Phenomena in Confined Soft Matter: Irreversible Adsorption, Physical Aging and Glass Transition at the Nanoscale.
 Springer International Publishing. p. 189-206, 2015.
 ISBN: 978-331921948-6; 978-331921947-9

6.4 TESIS DOCTORALES / PH.D. THESES

6.4.1 DPTO. DE QUÍMICA Y FÍSICA TEÓRICAS / THEORETICAL PHYSICS AND CHEMISTRY

Title: Correlaciones en espaciotiempos cuánticos: falsabilidad del multiverso.
University: Facultad de Ciencias Físicas, Universidad Complutense de Madrid.
Date: 26th June 2015.
Mark: Sobresaliente “cum laude”.
Candidate: Ana Alonso Serrano.
Supervisor: P. F. González-Díaz, Guillermo A. Mena Marugán, and Luis J. Garay.

Title: Discrete Quantum Geometries and their Effective Dimension.
University: University of Potsdam, Germany.
Date: 2nd July 2015.
Mark: Magna cum laude.
Candidate: Johannes Thürigen.
Supervisor: Gianluca Calcagni, and D. Oriti.

6.4.2 DPTO. DE ESPECTROSCOPÍA NUCLEAR, VIBRACIONAL Y DE MEDIOS DESORDENADOS / NUCLEAR, VIBRATIONAL AND DISORDERED MEDIA SPECTROSCOPY

Title: Surface Enhanced Raman Spectroscopy (SERS) of Biomolecules using ultrasensitive plasmonic metal nanoparticles.
University: Facultad de Ciencias, Universidad Autónoma de Madrid.
Date: 20th November 2015.
Mark: Sobresaliente Mención Internacional.
Candidate: Adíanez García Leis.
Supervisor: Santiago Sánchez Cortés.

Title: Análisis de la Reacción de un Núcleo Halo de un Neutrón contra un Blanco Pesado a Energías alrededor de la Barrera Coulombiana. El Caso de ^{11}Be contra ^{197}Au .

University: Facultad de Ciencias Físicas, Universidad Complutense de Madrid.

Date: 18th June 2015.

Mark: Sobresaliente “cum laude”.

Candidate: Vicente Pesudo Fortes.

Supervisor: M^a José García Borge and Antonio Moro Muñoz.

Title: Estudios más allá de la Línea de Goteo de Neutrinos usando Reacciones ($p, 2p$) Cuasi-Libres: El Caso del ^{13}BE .

University: Facultad de Ciencias Físicas, Universidad Complutense de Madrid.

Date: 3rd July 2015.

Mark: Sobresaliente “cum laude”.

Candidate: Guillermo Ribeiro Jiménez.

Supervisor: Olof Tengblad and Enrique Nácher González.

Title: Decay Spectroscopy of Neutron-Rich Cadmium Isotopes.

University: Facultad de Ciencias Físicas, Universidad Autónoma de Madrid.

Date: 11th May 2015.

Mark: Sobresaliente “cum laude”.

Candidate: Jan Taprogge.

Supervisor: Andrea Jungclaus.

6.4.4 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

Title: Protein-protein interactions in epidermal growth factor receptors through molecular dynamics.

Type: PhD thesis.

University: Universidad Autónoma de Madrid

Date: 23th of January 2015.

Mark: Sobresaliente.

Candidate: Juan Felipe Franco González.

Supervisors: Víctor Luis Cruz Cañas.

6.5 TRABAJOS DE MÁSTER, GRADO Y OTRAS TITULACIONES / MASTER, GRADE AND OTHER DEGREES THESES

6.5.1 DPTO. DE QUÍMICA Y FÍSICA TEÓRICA / THEORETICAL PHYSICS AND CHEMISTRY

Title: Inhomogeneidades y descripciones efectivas en cosmología cuántica de lazos.

Type: Master thesis.

University: Facultad de Ciencias Físicas, Universidad Complutense de Madrid.

Date: 30th of June 2015.

Mark: Sobresaliente.

Candidate: Beatriz Elizaga.

Supervisor: Mercedes Martín Benito and Guillermo A. Mena Marugán.

Title: Mecánica local, no local y alocal.

Type: Master thesis.

University: Facultad de Ciencias Físicas, Universidad Complutense de Madrid.

Date: 1st of September 2015.

Mark: Sobresaliente.

Candidate: Ismael Ayuso.

Supervisor: José Alberto Cembranos and Luis J. Garay.

6.5.2 DPTO. DE ESPECTROSCOPÍA NUCLEAR, VIBRACIONAL Y DE MEDIOS DESORDENADOS / NUCLEAR, VIBRATIONAL AND DISORDERED MEDIA SPECTROSCOPY

Title: Development of Enhanced Vibrational Techniques for the Analysis of Artistic Materials.

Type: Master Thesis.

University: University of Bologna (Italy).

Date: 11th of December 2015.

Mark: Sobresaliente.

Candidate: Maria Sole Zalaffi.

Supervisors: Silvia Prati and Santiago Sánchez Cortés.

Title: Detection of atrazine and prometryn via surface-enhanced Raman scattering (SERS) using silver nanoparticles with different morphologies.

Type: Master Thesis.

University: Universidade Estadual de São Paulo (Brasil).

Date: 15th of December 2015.

Mark: Sobresaliente.

Candidate: Rafael Jesus Gonçalves.

Supervisors: Carlos José Leopoldo Constantino and Santiago Sánchez Cortés.

Title: Diagnóstico de haz “on-line” en HIE-ISOLDE. Beam diagnosis on-line at HIE-ISOLDE.

Type: Master Thesis.

University: Universidad Complutense de Madrid (Spain).

Date: 5th of October 2015.

Mark: Sobresaliente.

Candidate: Álvaro Tolosa.

Supervisors: Olof Tengblad, Alejandro Garzón Camacho and Enrique Nácher González.

6.5.4 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

Title: Propiedades viscoelásticas de nanocompuestos de poly-ε-caprolactona y nanotubos de carbono.

Type: Trabajo Fin de carrera

University: Universidad Rey Juan Carlos (Madrid).

Date: 31st of March 2015.

Mark: Sobresaliente.

Candidate: Joel Fernández.

Supervisor: Juan Francisco Vega Borrego and María Teresa Expósito Espinosa.

CAPÍTULO 7
TABLAS Y DATOS

CHAPTER 7
TABLES AND DATA

7.1 DATOS COMPARATIVOS CON LAS PREVISIONES DEL PLAN ESTRATÉGICO / DATA COMPARED TO EXPECTATIONS FROM THE STRATEGIC PLAN

	Expected 2010	2010	Expected 2011	2011	Expected 2012	2012	Expected 2013	2013	Expected 2014	2014	Expected 2015	2015
Number of ISI publications	152	174	163	186	173	182	182	179	180	187	190	155
Number of non-ISI publications	-	28	-	18	-	12	-	13	-	18	-	16
Total stock of PhD fellowships and contracts	-	25	-	23	-	18	-	22	-	22	-	18
Stock of postdoc fellowships and contracts	-	22	-	23	-	18	-	18	-	7	-	5
Number of PhD Theses defended	7	8	7	5	8	8	10	5	6	8	5	7
"Créditos" in PhD, MSc and BSc Courses	33,8	41,4	34,8	63,5	35,4	57,4*	36	82,4*	12	32,9*	33,2	88*

*Includes data of BSc courses.

7.2 RESUMEN DE PUBLICACIONES EN REVISTAS JCR-ISI / SUMMARY OF PUBLICATIONS IN JCR-ISI-JOURNALS

JOURNAL	NUMBER OF PAPERS	IMPACT FACTOR (JCR - 2014)
Progress in Materials Science	1	27.417
Nano Letters	1	13.592
Astrophysical Journal, Supplement Series	1	11.215
Physical Review X	1	9.043
Physical Review Letters	3	7.512
Nanoscale	1	7.394
ACS Applied Materials and Interfaces	3	6.723
Physics Letters, Section B	5	6.131
Journal of High Energy Physics	1	6.111
Astrophysical Journal	3	5.993
Journal of Cosmology and Astroparticle Physics	3	5.810
Macromolecules	3	5.800
Analytical Chemistry	1	5.636
Atmospheric Chemistry and Physics	1	5.053
Journal of Physical Chemistry C	3	4.772
Journal of Materials Chemistry C	1	4.696
Physical Review D - Particles, Fields, Gravitation and Cosmology	6	4.643
Physical Chemistry Chemical Physics	2	4.493
Langmuir : the ACS journal of surfaces and colloids	1	4.457
Astronomy and Astrophysics	1	4.378
Ultrasonics Sonochemistry	1	4.321
Soft Matter	1	4.029
RSC Advances	1	3.840
Journal of Polymer Science, Part B: Polymer Physics	1	3.830
Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics	4	3.736
Physical Review C - Nuclear Physics	20	3.733

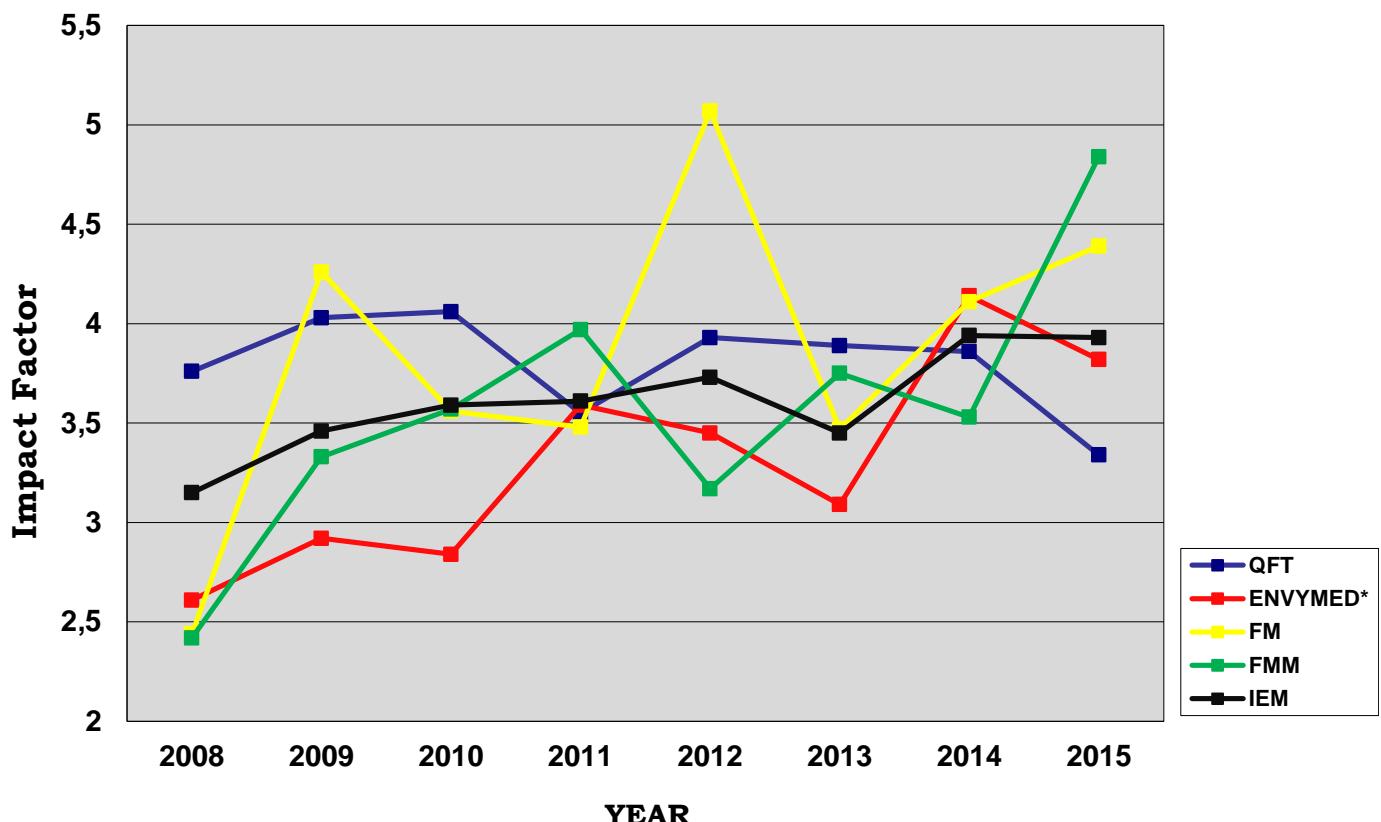
Plasma Sources Science and Technology	1	3.591
Composites Science and Technology	1	3.569
Polymer	3	3.562
Microporous and Mesoporous Materials	1	3.453
Analytical and Bioanalytical Chemistry	1	3.436
Food Chemistry	1	3.391
Journal of Physical Chemistry B	1	3.302
Spectrochimica Acta - Part B: Atomic Spectroscopy	1	3.176
Classical and Quantum Gravity	2	3.168
European Polymer Journal	2	3.005
Journal of Chemical Physics	6	2.952
Physical Review A - Atomic, Molecular, and Optical Physics	1	2.808
European Physical Journal A	3	2.736
Applied Surface Science	2	2.711
The journal of physical chemistry, A	4	2.693
Food and Bioprocess Technology	1	2.691
Journal of Raman Spectroscopy	1	2.671
Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer	1	2.645
Applied Clay Science	1	2.467
Construction and Building Materials	1	2.296
Physical Review E - Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics	1	2.288
Theoretical Chemistry Accounts	1	2.233
Annals of Physics	1	2.103
Journal of Optics	1	2.059
Vibrational Spectroscopy	1	2.003
Journal of Polymer Research	1	1.920
Colloid and Polymer Science	1	1.865
IEEE Transactions on Instrumentation and Measurement	1	1.790
Journal of Applied Polymer Science	1	1.768
Journal of Non-Crystalline Solids	1	1.766
International Journal of Modern Physics D	1	1.741
Molecular Physics	1	1.720
Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical	1	1.583
Computational and Theoretical Chemistry	1	1.545
Nuclear Instruments & Methods In Physics Research Section A	2	1.216
Molecular Simulation	1	1.133
Nuclear Instruments and Methods in Physics Research, Section B	2	1.124
Canadian Journal of Physics	1	0.964
Materiales de Construcción	1	0.961
Romanian Journal of Physics	1	0.924
Acta Physica Polonica, Series B	3	0.850
Few-Body Systems	1	0.768
European Journal of Physics	1	0.629
Electronic Journal of Combinatorics	1	0.485
Journal of Polymer Engineering	1	0.465
TOTAL:	134	Average Impact Factor: 3.93

Number of Journals: 71

7.3 **EVOLUCIÓN DEL ÍNDICE DE IMPACTO (REVISTAS JCR-ISI) POR DEPARTAMENTOS / EVOLUTION OF THE IMPACT FACTOR (JCR-ISI-JOURNALS) BY DEPARTMENTS**

Department Key:

Theoretical Physics and Chemistry: QFT
 Molecular Physics: FM
 Macromolecular Physics: FMM
 Nuclear, Vibrational and
 Disordered Media Spectroscopy ENVYMED



* El Dpto.de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados (ENVYMED) fue creado en febrero del 2011, por lo que los datos comparativos de los años 2008 a 2010 han sido tomados de los antiguos departamentos que lo componían: el de Física Nuclear y Física Estadística y el de Espectroscopía Vibracional y Procesos Multifotónicos/

The ENVYMED Department was created in February of 2011. The comparative data for the years 2008-2010 have been taken from those of the former departments from which it was formed: The Nuclear Physics and Statistical Physics Dept. and the Vibrational Spectroscopy and Multiphotonic Processes Dept.

7.4 PERSONAL POR DEPARTAMENTOS / PERSONNEL BY DEPARTMENTS

DPTO.	Scientific Staff		“Ramón & Cajal”		Other PostDocs		Adjoint Researchers		Rest of the Scientific Personnel ¹		Support Staff		Total		
	M	F	M	F	M	F	M	F	M	F	M	F	M	F	TOTAL
QFT	7	1	1	-	1	-	2	2	-	1	-	-	11	4	15
ENVYMED	9	3	-	-	-	-	-	2	7	2	2	1	18	8	26
FM	10	2	1	-	-	1	1	-	3	1	2	-	17	4	21
FMM	6	5	1	-	-	-	1	1	1	3	1	1	10	10	20
ADMON.	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	2	10	2	10	12
IEM	32	11	3	-	1	1	4	5	11	7	7	12	58	36	94

¹“Authorized Stay” excluded

(M: Male, F: Female. See also the “Department Key” in section 7.3)

Personal del IEM sin incluir Drs. Vinculados /
Personnel of the IEM excluding the Adjoint Researchers: 85

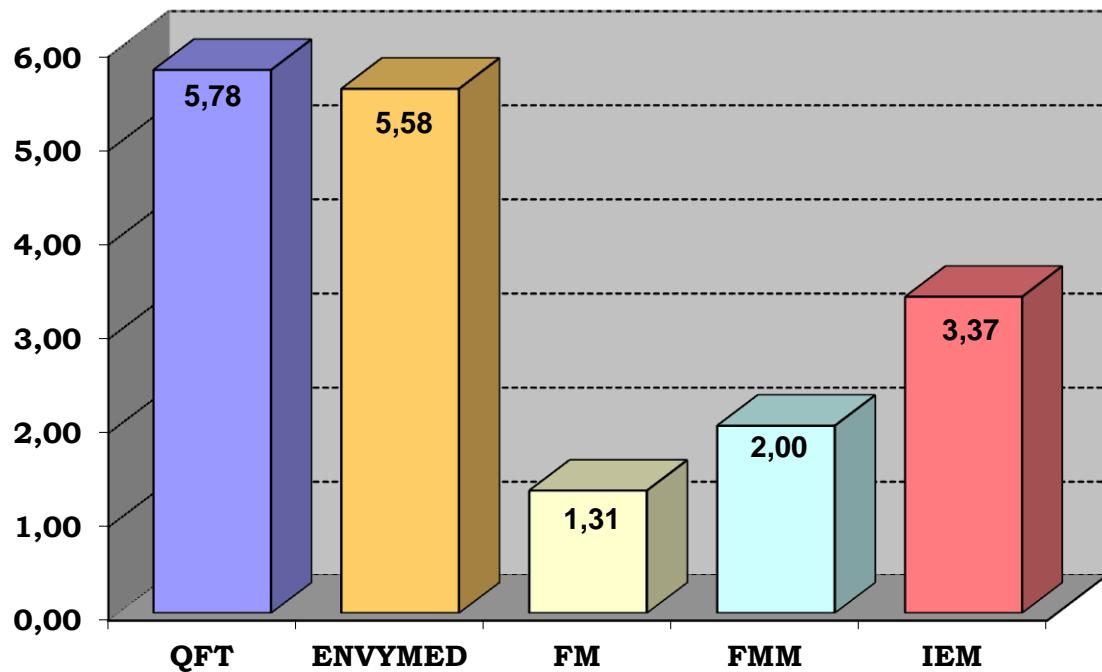
7.5 NÚMERO DE PUBLICACIONES POR DEPARTAMENTOS / NUMBER OF PAPERS BY DEPARTMENTS

	QFT	ENVYMED	FM	FMM	IEM
ISI publications	48(+4)¹	64(+3)¹	15(+2)¹	23(+1)¹	155
Other publications	7	7	1	1	16

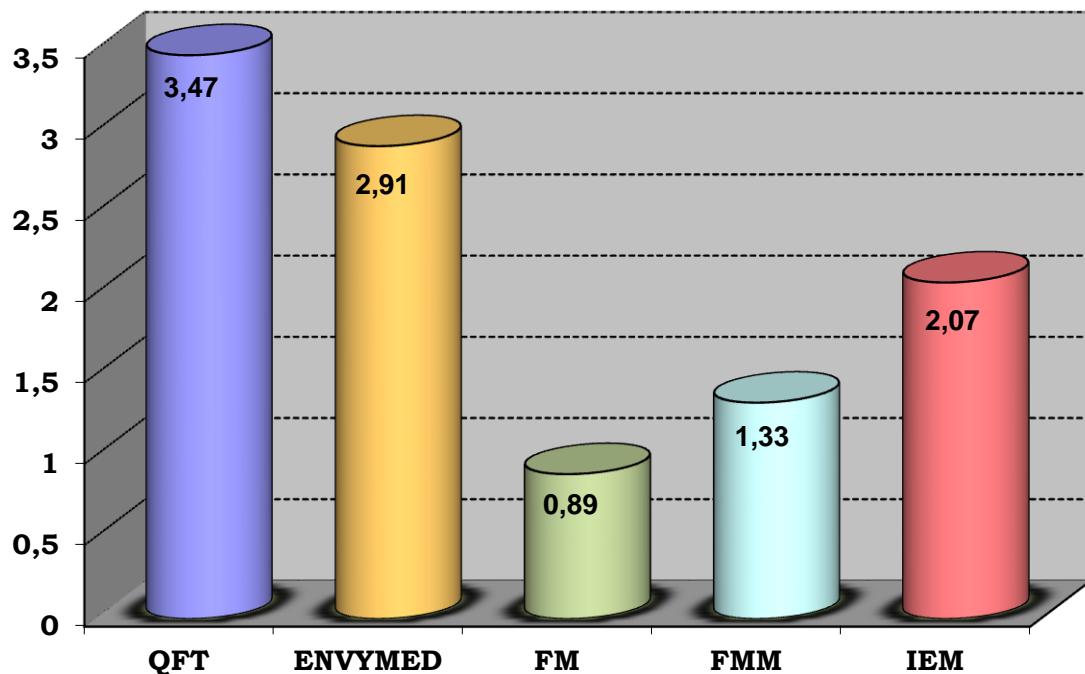
¹In parenthesis, papers shared with other Departments.

7.6 RATIO DE PUBLICACIONES JCR-ISI POR DEPARTAMENTOS / RATIO OF JCR-ISI PUBLICATIONS BY DEPARTMENTS

- **Ratio por investigador senior** (personal de plantilla más contratados “Ramón y Cajal”) / *Ratio by senior researcher (staff plus “Ramón y Cajal”).*



- **Ratio por personal científico** (sin incluir personal de apoyo) / *Ratio by scientific staff (excluding support staff).*



(See “Department Key” in section 7.3)

- **Ratio de publicaciones ISI del IEM por personal investigador senior /** *Ratio of ISI publications of IEM per senior staff researcher: 3,60*

ÍNDICE

INDEX

Introducción	3
Introduction	4
1. Estructura del Instituto / Structure of the Institute	5
Dirección / Direction	6
Junta de Instituto / Institute Board	6
Claustro Científico / Scientific Staff.....	6
Departamentos de Investigación / Research Departments	7
Dpto. de Química y Física Teóricas/ Theoretical Physics and Chemistry	7
Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados/ Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy	8
Dpto. de Física Molecular/ Molecular Physics	9
Dpto. de Física Macromolecular/ Macromolecular Physics	9
Unidad de Gestión Económica-Administrativa / Financial and Administrative Office	10
Servicios del Centro de Física Miguel A. Catalán / Service Units of the Center of Physics CFMAC	10
2A. Labor Investigadora	12
2A.1 Dpto. de Química y Física Teóricas.....	13
2A.2 Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados.....	19
2A.3 Dpto. de Física Molecular.....	28
2A.4 Dpto. de Física Macromolecular.....	35
2B. Research Activities.....	42
2B.1 Theoretical Physics and Chemistry Dept.	43
2B.2 Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy Dept.....	48
2B.3 Molecular Physics Dept.	58
2B.4 Macromolecular Physics Dept.....	64
3. Proyectos de Investigación / Research Grants	71
3.1 Dpto. de Química y Física Teóricas/ Theoretical Physics and Chemistry	72
3.2 Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados/ Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy	74
3.3 Dpto. de Física Molecular/ Molecular Physics	76
3.4 Dpto. de Física Macromolecular/ Macromolecular Physics	78
4. Cooperación Científica / Scientific Cooperation	80
4.1 Congresos y Reuniones / Congresses and Meetings.....	81
4.1.1 Dpto. de Química y Física Teóricas/. Theoretical Physics and Chemistry	81
4.1.2 Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados/ Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy	83

4.1.3	Dpto. de Física Molecular/ Molecular Physics	85
4.1.4	Dpto. de Física Macromolecular/ Macromolecular Physics	87
4.2	Estancias de Investigadores en el Instituto / Visitors	89
4.2.1	Dpto. de Química y Física Teóricas/ Theoretical Physics and Chemistry.....	89
4.2.2	Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados/ Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy	89
4.3	Conferencias de Investigadores Invitados / Invited Researches Conferences.....	90
4.3.1	Dpto. de Química y Física Teóricas/ Theoretical Physics and Chemistry.....	90
4.3.2	Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados/ Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy	92
4.4	Visitas de Investigadores a Centros Internacionales / Visits to Foreing Institutions	93
4.4.1	Dpto. de Química y Física Teóricas/ Theoretical Physics and Chemistry.....	93
4.4.2	Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados/ Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy	93
4.4.3	Dpto. de Física Molecular/ Molecular Physics	94
4.4.4	Dpto. de Física Macromolecular/ Macromolecular Physics	94
5.	Labor Docente, Difusión de la Ciencia y Otras Actividades / Teaching, Outreach, and Other Activities	95
5.1	Docencia / Teaching	96
5.1.1	Dpto. de Química y Física Teóricas/ Theoretical Physics and Chemistry.....	96
5.1.2	Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados/ Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy	96
5.1.3	Dpto. de Física Molecular/ Molecular Physics	97
5.1.4	Dpto. de Física Macromolecular/ Macromolecular Physics	97
5.2	Cursos, Conferencias y Seminarios / Courses, Conferences and Seminars	98
5.2.1	Dpto. de Química y Física Teóricas/ Theoretical Physics and Chemistry	98
5.2.2	Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados/ Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy	99
5.2.3	Dpto. de Física Molecular/ Molecular Physics	100
5.2.4	Dpto. de Física Macromolecular/ Macromolecular Physics	101
5.3	Premios y Otros Méritos /Awards.....	101
5.3.1	Dpto. de Química y Física Teóricas/ Theoretical Physics and Chemistry	101
5.3.2	Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados/ Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy	102
5.3.3	Dpto. de Física Molecular/ Molecular Physics.....	102
5.3.4	Dpto. de Física Macromolecular/ Macromolecular Physics	103
5.4	Actividades y Material de Divulgación / Outreach Activities and Material	104
5.4.1	Dpto. de Química y Física Teóricas/Theoretical Physics and Chemistry	104
5.4.2	Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados/ Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy	105

5.4.3	Dpto. de Física Molecular/ Molecular Physics	108
5.4.4	Dpto. de Física Macromolecular/ Macromolecular Physics	109
5.5	Transferencia de Tecnología / Transfer of Technology	110
5.5.2	Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados/ Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy	110
5.5.4	Dpto. de Física Macromolecular/ Macromolecular Physics	110
5.6	Unidades Asociadas y Otras Actividades / Associated Units and Other Activities	110
5.6.1.	Dpto. de Química y Física Teóricas/ Theoretical Physics and Chemistry	110
5.6.2	Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados/ Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy	111
5.6.3	Dpto. de Física Molecular/ Molecular Physics	111
5.6.4	Dpto. de Física Macromolecular/ Macromolecular Physics	111
6.	Publicaciones y Producción Científica / Publications and Scientific Production.....	113
6.1	Publicaciones en Revistas y Proceedings ISI / ISI Publications	114
6.1.1	Dpto. de Química y Física Teóricas/ Theoretical Physics and Chemistry	114
6.1.2	Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados/ Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy	117
6.1.3	Dpto. de Física Molecular/ Molecular Physics	125
6.1.4	Dpto. de Física Macromolecular/ Macromolecular Physics	126
6.2	Publicaciones en Revistas No JCR-ISI / Non JCR-ISI Publications	128
6.2.1	Dpto. de Química y Física Teóricas/ Theoretical Physics and Chemistry	128
6.2.2	Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados/ Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy	128
6.3	Libros, Monografías y otras Publicaciones de Proceedings / Books, Proceedings, and Other Publications	129
6.3.1	Dpto. de Química y Física Teóricas/ Theoretical Physics and Chemistry	129
6.3.2	Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados/ Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy	129
6.3.3	Dpto. de Física Molecular/ Molecular Physics	130
6.3.4	Dpto. de Física Macromolecular/ Macromolecular Physics	130
6.4	Tesis Doctorales / PhD Theses	130
6.4.1	Dpto. de Química y Física Teóricas/ Theoretical Physics and Chemistry	130
6.4.2	Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados/ Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy	130
6.4.4	Dpto. de Física Macromolecular/ Macromolecular Physics	131
6.5	Trabajos de Máster, Grado y Otras Titulaciones/Master, Grade and Other Degrees Theses	131
6.5.1	Dpto. de Química y Física Teóricas/ Theoretical Physics and Chemistry	131
6.5.2	Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados/ Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy	132
6.5.4	Dpto. de Física Macromolecular/ Macromolecular Physics	132

7. Tablas y Datos / Tables and Data	133
7.1 Datos comparativos con las previsiones del Plan Estratégico / Data compared to expectations from the Strategic Plan	134
7.2 Resumen de publicaciones en revistas JCR-ISI / Summary of publications in JCR-ISI journals	134
7.3 Evolución del índice de impacto (revistas JCR-ISI) por Departamentos / Evolution of the impact factor (JCR-ISI-Journals) by Departments	136
7.4 Personal por Departamentos / Personnel by Departments	137
7.5 Número de publicaciones por Departamentos / Number of publications by Departments	137
7.6 Ratio de publicaciones JCR-ISI por Departamentos / Ratio of JCR-ISI publications by Departments	138