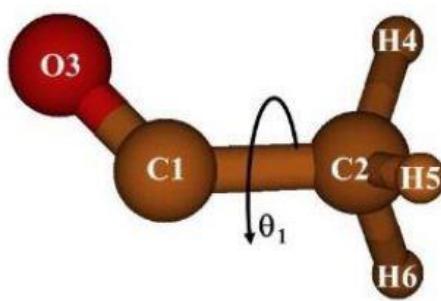
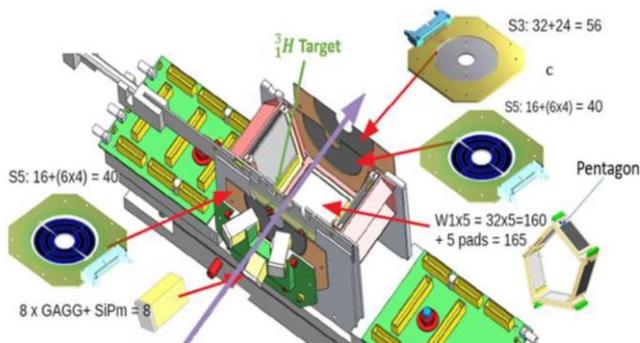


# Instituto de Estructura de la Materia

Consejo Superior de Investigaciones Científicas

## Memoria 2022

## Annual Report 2022





# MEMORIA ANUAL 2022

*SCIENTIFIC REPORT 2022*

INSTITUTO DE ESTRUCTURA DE LA MATERIA  
CONSEJO SUPERIOR DE INVESTIGACIONES CIENTÍFICAS  
C/ SERRANO, 113BIS, 119, 121, 123  
28006 MADRID  
TEF.: 91 561 68 00 FAX: 96 564 55 57  
WEB: [WWW.IEM.CSIC.ES](http://WWW.IEM.CSIC.ES)

# SUMARIO

---

<b>Introducción .....</b>	<b>1</b>
<i>Introduction .....</i>	<b>2</b>
<b>1. Estructura del Instituto / Structure of the Institute .....</b>	<b>3</b>
Dirección / Direction .....	4
Junta de Instituto / Institute Board .....	4
Claustro Científico / Scientific Staff.....	4
Departamentos de Investigación / Research Departments.....	5
• Dpto. de Química y Física Teóricas / Theoretical Physics and Chemistry .....	5
• Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados / Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy .....	6
• Dpto. de Física Molecular/ Molecular Physics .....	7
• Dpto. de Física Macromolecular/ Macromolecular Physics .....	8
Unidad de Gestión Económica-Administrativa / Financial and Administrative Office .....	9
Servicios del Centro de Física Miguel A. Catalán / Service Units of the Center of Physics CFMAC .....	9
<b>2A. Labor Investigadora .....</b>	<b>10</b>
2A.1 Dpto. de Química y Física Teóricas.....	11
2A.2 Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados.....	17
2A.3 Dpto. de Física Molecular.....	29
2A.4 Dpto. de Física Macromolecular.....	33
<b>2B. Research Activities.....</b>	<b>38</b>
2B.1 Theoretical Physics and Chemistry Department .....	39
2B.2 Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy Department.....	45
2B.3 Molecular Physics Department .....	57
2B.4 Macromolecular Physics Department.....	61
<b>3. Proyectos de Investigación / Research Grants .....</b>	<b>65</b>
3.1 Dpto. de Química y Física Teóricas / Theoretical Physics and Chemistry .....	66
3.2 Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados / Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy .....	67
3.3 Dpto. de Física Molecular / Molecular Physics.....	69
3.4 Dpto. de Física Macromolecular / Macromolecular Physics .....	70

<b>4. Cooperación Científica / Scientific Cooperation .....</b>	<b>72</b>
<b>4.1 Congresos y Reuniones / Congresses and Meetings.....</b>	<b>73</b>
4.1.1 Dpto. de Química y Física Teóricas / Theoretical Physics and Chemistry.....	73
4.1.2 Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados / Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy .....	75
4.1.3 Dpto. de Física Molecular / Molecular Physics.....	77
4.1.4 Dpto. de Física Macromolecular / Macromolecular Physics .....	79
<b>4.2 Estancias de Investigadores en el Instituto / Visitors .....</b>	<b>80</b>
4.2.1 Dpto. de Química y Física Teóricas / Theoretical Physics and Chemistry.....	80
4.2.2 Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados / Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy .....	81
4.2.3 Dpto. de Física Molecular / Molecular Physics.....	81
<b>4.3 Conferencias de Investigadores Invitados / Invited Researched Conferences .....</b>	<b>81</b>
4.3.1 Dpto. de Física Molecular / Molecular Physics.....	81
<b>4.4 Visitas de Investigadores a Centros Internacionales / Visits to Foreing Institutions .....</b>	<b>82</b>
4.4.1 Dpto. de Química y Física Teóricas / Theoretical Physics and Chemistry.....	82
4.4.2 Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados / Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy .....	82
4.4.3 Dpto. de Física Molecular / Molecular Physics.....	83
4.4.4 Dpto. de Física Macromolecular / Macromolecular Physics .....	83
<b>5 Labor Docente, Difusión de la Ciencia y Otras Actividades / Teaching, Outreach, and Other Activities .....</b>	<b>84</b>
<b>5.1 Docencia / Teaching .....</b>	<b>85</b>
5.1.1 Dpto. de Química y Física Teóricas / Theoretical Physics and Chemistry.....	85
5.1.2 Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados / Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy .....	85
5.1.3 Dpto. de Física Molecular / Molecular Physics.....	85
5.1.4 Dpto. de Física Macromolecular / Macromolecular Physics .....	86
<b>5.2 Cursos, Conferencias y Seminarios / Courses, Conferences and Seminars .....</b>	<b>86</b>
5.2.1 Dpto. de Química y Física Teóricas / Theoretical Physics and Chemistry .....	86
5.2.2 Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados / Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy .....	87
5.2.3 Dpto. de Física Molecular / Molecular Physics.....	87
5.2.4 Dpto. de Física Macromolecular / Macromolecular Physics .....	88
<b>5.3 Premios y Otros Méritos / Awards.....</b>	<b>88</b>
5.3.1 Dpto. de Química y Física Teóricas / Theoretical Physics and Chemistry.....	88
5.3.2 Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados / Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy .....	89
5.3.3 Dpto. de Física Molecular / Molecular Physics.....	89
5.3.4 Dpto. de Física Macromolecular / Macromolecular Physics .....	89

<b>5.4 Actividades y Material de Divulgación / Outreach Activities and Material .....</b>	<b>90</b>
5.4.1 Dpto. de Química y Física Teóricas / Theoretical Physics and Chemistry .....	90
5.4.2 Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados / Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy .....	91
5.4.3 Dpto. de Física Molecular / Molecular Physics.....	92
5.4.4 Dpto. de Física Macromolecular / Macromolecular Physics .....	92
<b>5.5 Transferencia de Tecnología / Transfer of Technology .....</b>	<b>93</b>
5.5.1 Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados / Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy .....	93
5.5.2 Dpto. de Física Macromolecular / Macromolecular Physics .....	94
<b>5.6 Unidades Asociadas y Otras Actividades / Associated Units and Other Activities .....</b>	<b>94</b>
5.6.1 Dpto. de Química y Física Teóricas / Theoretical Physics and Chemistry .....	94
5.6.2 Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados / Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy .....	95
5.6.3 Dpto. de Física Molecular / Molecular Physics.....	95
5.6.4 Dpto. de Física Macromolecular / Macromolecular Physics.....	95
<b>6. Publicaciones y Producción Científica / Publications and Scientific Production.....</b>	<b>96</b>
<b>6.1 Publicaciones en Revistas y Proceedings ISI / ISI Publications .....</b>	<b>97</b>
6.1.1 Dpto. de Química y Física Teóricas / Theoretical Physics and Chemistry .....	97
6.1.2 Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados / Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy .....	99
6.1.3 Dpto. de Física Molecular / Molecular Physics.....	102
6.1.4 Dpto. de Física Macromolecular / Macromolecular Physics.....	103
<b>6.2 Publicaciones en Revistas NO JCR/ISI / NON JCR/ISI .....</b>	<b>104</b>
6.2.1 Dpto. de Química y Física Teóricas / Theoretical Physics and Chemistry.....	104
6.2.2 Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados / Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy.....	104
6.2.3 Dpto. de Física Molecular / Molecular Physics.....	104
<b>6.3 Libros, Monografías y otras Publicaciones de Proceedings / Books, Proceedings, and Other Publications.....</b>	<b>105</b>
6.3.1 Dpto. de Química y Física Teóricas / Theoretical Physics and Chemistry.....	105
6.3.2 Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados / Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy.....	105
<b>6.4 Tesis Doctorales / PhD Theses.....</b>	<b>105</b>
6.4.1 Dpto. de Química y Física Teóricas / Theoretical Physics and Chemistry.....	105
<b>6.5 Trabajos de Máster, Grado y Otras Titulaciones / Master, Grade and Other Degrees Theses....</b>	<b>105</b>
6.5.1 Dpto. de Química y Física Teóricas / Theoretical Physics and Chemistry.....	105
6.5.2 Dpto. de Física Molecular / Molecular Physics .....	106

<b>7. Tablas y Datos / Tables and Data .....</b>	<b>107</b>
7.1 Datos comparativos con las previsiones del Plan Estratégico / Data compared to expectations from the Strategic Plan .....	108
7.2 Resumen de publicaciones en revistas JCR-ISI / Summary of publications in JCR-ISI journals .....	108
7.3 Evolución del índice de impacto (revistas JCR-ISI) por Departamentos / Evolution of the impact factor (JCR-ISI-Journals) by Departments .....	110
7.4 Personal por Departamentos / Personnel by Departments.....	111
7.5 Número de publicaciones por Departamentos / Number of publications by Departments.....	111
7.6 Ratio de publicaciones JCR-ISI por Departamentos / Ratio of JCR-ISI publications by Departments.....	112

# INTRODUCCIÓN

El Instituto de Estructura de la Materia (IEM) es un Instituto de Investigación sólidamente asentado en el CSIC y de gran visibilidad 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 2022, 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 Astrofísica, 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, Ciencia de los Materiales y Biofísica.

En sus comienzos en 1976 el instituto contaba con cinco científicos en plantilla. En la actualidad, acoge a unos treinta y siete 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 Informática, Mantenimiento, Almacén, 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 para contribuir de forma decisiva a resolver los principales retos que la sociedad afronta.

Esta actividad científica ha quedado plasmada durante 2022 en 88 publicaciones ISI.

## INTRODUCTION

The Institute of Structure of Matter (IEM) aims to be a Research Institute deeply entrenched in the CSIC and highly visible 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 2022, 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, Astrophysics, 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, Materials Science and Biophysics.

In its beginnings in 1976 the institute had five scientists on staff. Currently, IEM hosts around thirty-seven 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 Computing, Maintenance and Warehouse 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 to boldly contribute to solve the main challenges that society faces.

This scientific activity, during 2022, has crystallized in 88 ISI publications.

## **Capítulo 1**

### **ESTRUCTURA DEL INSTITUTO**

*Chapter 1*

*INSTITUTE ORGANIZATION*

**DIRECCIÓN / DIRECTION**

**Director / Director:** Prof. Tiberio Ezquerra Sanz

**Vicedirector 1º/Assistant Director 1<sup>st</sup>:** Dr. Rafael A. Molina Fernández

**Vicedirectora 2ª/Assistant Director 2<sup>nd</sup>:** Dra. Mª Luisa Senent Diez

**Gerente/Manager:** Dª. Isabel Llerena de Frutos

**JUNTA DE INSTITUTO / INSTITUTE BOARD**

**Presidente / President:** Prof. Tiberio Ezquerra Sanz

**Secretaria / Secretary:** Dª. Isabel Llerena de Frutos

**Vocales / Members:**

Dr. Carlos Cabrillo

Dª. Mª Carmen García Collado

Dra. Mª Cruz García Gutiérrez

Dr. Eduardo Garrido Bellido

Dr. Guillermo A. Mena Marugán

Dr. Rafael A. Molina Fernández

Dra. Aurora Nogales Ruiz

Dra. Mª Luisa Senent Diez

Dr. Guzmán Tejeda Gala

Dr. Vicente Timón Salinero

**CLAUSTRO CIENTÍFICO / SCIENTIFIC STAFF**

**Presidente / President:** Prof. Tiberio Ezquerra Sanz

**Secretario / Secretary:** Dr. Ramón Peláez de Fuentes

**Personal Investigador / Scientific staff:**

Prof. J. Fernando Barbero González

Dr. Carlos Cabrillo García

Dr. Gianluca Calcagni

Dra. Mª Vega Cañamares Arribas

Dra. María José Capitán Aranda

Dr. Víctor Cruz Cañas

Dr. José Luis Doménech Martínez

Dr. Ricardo Fernández Perea

Dr. José M. Fernández Sánchez

Profª. María José García Borge

Dra. María Cruz García Gutiérrez

Dr. Eduardo Garrido Bellido

Dr. Vincenzo Giannini (excedencia 30 de sept.)

Prof. José González Carmona

Prof. Víctor J. Herrero Ruiz de Loizaga

Dra. Andrea Jungclaus

Dra. Amelia Linares Dos Santos

(jubilación 31 de diciembre)

Prof. Javier Martínez de Salazar Bascuñana  
(jubilación 12 de enero)

Dra. Mª del Sagrario Martínez Ramírez

Dr. Raúl Zósimo Martínez Torres

Dra. Belén Maté Naya

Dr. Guillermo A. Mena Marugán

Dr. Rafael A. Molina Fernández

Dra. Aurora Nogales Ruiz

Dr. Juan Ortigoso Martínez

Dr. Francisco Javier Ramos Díaz

Dr. Christophe Rappold

Dr. Santiago Sánchez Cortés

Dr. José Antonio Sánchez Gil

Dr. Gonzalo Santoro Domingo

Dr. Julio Francisco Santos Gómez

Prof. Pedro Sarriguren Suquilbide

Dra. Mª Luisa Senent Diez

Dra. Isabel Tanarro Onrubia

Dr. Guzmán Tejeda Gala

Prof. Olof E. I. Tengblad

Dr. Vicente Timón Salinero

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. Guillermo Antonio Mena Marugán

Investigador Científico / *Research Scientist*

**Personal Científico / Research Staff:**

Dr. José González Carmona

Profesor de Investigación / *Research Professor*

Dr. Pedro Sarriguren Suquilbide

Profesor de Investigación / *Research Professor*

Dr. Jorge Dukelsky Bercovich

Profesor de Investigación Ad Honorem /

*Research Professor Ad Honorem*

Dr. Jesús Fernando Barbero González

Investigador Científico / *Research Scientist*

Dr. Eduardo Garrido Bellido

Investigador Científico / *Research Scientist*

Dra. María Luisa Senent Diez

Investigadora Científica/ *Research Scientist*

Dr. Gianluca Calcagni

Científico Titular / *Tenured Scientist*

Dr. Rafael Alejandro Molina Fernández

Científico Titular/ *Tenured Scientist*

D. Alejandro García-Quismondo Martín

Contratado Predoctoral La Caixa /

*PhD Fellowship La Caixa*

D. Ángel López Corps

Contratado Predoctoral La Caixa /

*PhD Fellowship La Caixa*

D<sup>a</sup> Yuriko Caterina Baba

Otros (Estudiante de Doctorado) / Others (*PhD Student*)

D. Santiago Prado Loy

Otros (Estudiante de Doctorado) / Others (*PhD Student*)

D<sup>a</sup> Sinda Brahem Belkheria

Estancia Temporal / *Authorized Stay*

Dra. Samira Dalbouha

Estancia Temporal / *Authorized Stay*

D<sup>a</sup> Dorsaf Missaoui

Estancia Temporal / *Authorized Stay*

D<sup>a</sup> Sofía Pinto Muñoz

Estancia Temporal / *Authorized Stay*

Dr. Mohammed Salah

Estancia Temporal / *Authorized Stay*

D. Álvaro Torres Caballeros

Estancia Temporal / *Authorized Stay*

**Personal de apoyo / Support Staff:**

D<sup>a</sup> Marta García Olmos

Contratado Plan Investigo (desde 16 de octubre) /

*Contract (since October 16<sup>th</sup>)*

**DEPARTAMENTO DE ESPECTROSCOPÍA NUCLEAR, VIBRACIONAL Y DE MEDIOS DESORDENADOS.**  
**NUCLEAR, VIBRATIONAL AND DISORDERED MEDIA SPECTROSCOPY**

**Jefe del Departamento / Head of Department:**

Dr. Carlos Cabrillo García

Investigador Científico /*Research Scientist***Personal Científico / Research Staff:**Prof.<sup>a</sup>. M<sup>a</sup> José García BorgeProfesora de Investigación /*Research Professor*

Prof. Olof Erik Tengblad

Profesor de Investigación / *Research Professor*

Dra. Andrea Jungclaus

Investigadora Científica / *Research Scientist*

Dr. Santiago Sánchez Cortés

Investigador Científico / *Research Scientist*

Dr. José Antonio Sánchez Gil

Investigador Científico / *Research Scientist*Dra. M<sup>a</sup> Vega Cañamares ArribasCientífica Titular / *Tenured Scientist*

Dr. Ricardo Fernández Perea

Científico Titular / *Tenured Scientist*

Dr. Vincenzo Giannini

Científico Titular (hasta 30 de Sept.) / *Tenured Scientist (until Sept.30<sup>th</sup>)*

Dra. Sagrario Martínez Ramírez

Científica Titular / *Tenured Scientist*

Dr. Christophe Marie Jean Rappold

Postdoctoral Atracción Talento Investigador CM / *Postdoc Contract CM*

Dr. José Antonio Briz Monago

Doctor Vinculado (desde 21 de enero hasta 30 de junio) / *Adjoint Researcher (since January 21<sup>st</sup> until June 30<sup>th</sup>)*

Dra. Ana Crespo Ibáñez

Contratada Personal Tec. de Apoyo / *PTA Contract*

D. Jaime Acosta Loza

Titulado Sup. Contratado C/P (desde 16 de febrero) / *University Graduate (since February 16<sup>th</sup>)*

D. Vicente García Távora

Titulado Sup. Contratado C/P/*University Graduate*

D. Álvaro Buendía Gallego

Contratado Predoctoral FPI / *PhD Fellowship FPI*

D. Daniel Fernández Ruiz

Contratado Predoctoral FPI / *PhD Fellowship*

D. Carlos Ferrera González

Contratado Predoctoral FPI (desde 1 de febrero) / *PhD Fellowship (since February 1<sup>st</sup>)*

D. Samuel Escrig López

Contratado Predoctoral CM / *PhD Fellowship CM*D<sup>a</sup> Amanda N. Neric AguirreTitulado Superior Contratado cargo a proyecto / *University Graduate*D<sup>a</sup> Zeynep AkbasEstancia Temporal / *Authorized Stay*

Dr. Guilherme Dognani

Estancia Temporal / *Authorized Stay*D<sup>a</sup> Francisca Fuenzalida SandovalEstancia Temporal / *Authorized Stay*

D. Federico Puliga

Estancia Temporal / *Authorized Stay*

D. José Luis Pura Ruiz

Estancia Temporal / *Authorized Stay*D<sup>a</sup> Michela RampaEstancia Temporal / *Authorized Stay*

D. Salvatore Rapisarda

Estancia Temporal / *Authorized Stay***Personal de apoyo / Support Staff:**

D. Ángel Perea Martínez

Técnico Superior Especializado OPIS / *Especialized University Graduate*D<sup>a</sup>. Jessica Roldán CoronelContrato GARJUR (hasta 15 de marzo) / *Contract GARJUR (until March 15<sup>th</sup>)*Titulado Superior Contratado con C/P (desde 21 de octubre) / *University Graduate (since October 21<sup>st</sup>)*

**DEPARTAMENTO DE FÍSICA MOLECULAR  
MOLECULAR PHYSICS**

**Jefe del Departamento / Head of Department:**

Dr. Guzmán Tejeda Gala

Científico Titular /*Tenured Scientist*

**Personal Científico / Research Staff:**

Prof. Víctor José Herrero Ruiz de Loizaga

Profesor de Investigación / *Research Professor*

Prof. Salvador Montero Martín

Profesor de Investigación “Ad Honorem” (hasta 21 de

mayo) / *Research Professor “Ad Honorem”*

(until May 21<sup>st</sup>)

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. M<sup>a</sup> Belén Maté Naya

Científica Titular / *Tenured Scientist*

Dr. Juan Ortigoso Martínez

Científico Titular / *Tenured Scientist*

Dr. Ramón Javier Peláez de Fuentes

Científico Titular / *Tenured Scientist*

Dr. Julio Francisco Santos Gómez

Científico Titular / *Tenured Scientist*

Dr. Vicente Timón Salinero

Científico Titular / *Tenured Scientist*

D. Carlos Álvarez Nicolás

Contratado Predoctoral FPI / *PhD Fellowship*

D. Denís Paredes Roibás

Otros (Estudiante de Doctorado) /

Others (*PhD Student*)

D<sup>a</sup> Celia Adjal

Estancia Temporal / *Authorized Stay*

D. Slaven Bajic

Estancia Temporal / *Authorized Stay*

D<sup>a</sup> Islem Ben Bouikha

Estancia Temporal / *Authorized Stay*

Dra. Yanela Méndez González

Estancia Temporal / *Authorized Stay*

D<sup>a</sup> Carla Tamai

Estancia Temporal / *Authorized Stay*

**Personal de apoyo / Support Staff:**

D. Miguel Ángel Moreno Alba

Ayudante de Investigación OPI / *Research Assistant OPIs*

D. Ángel Luis González Valdenebro

Técnico Especializado de OPI / *Specialist Technician OPIs*

## DEPARTAMENTO DE FÍSICA MACROMOLECULAR MACROMOLECULAR PHYSICS

**Jefa del Departamento / Head of Department:**Dra. M<sup>a</sup> Cruz García Gutiérrez

Investigadora Científica / Research Scientist

**Personal Científico / Research Staff:**

Prof. Tiberio A Ezquerra

Profesor de Investigación / Research Professor

Prof. Javier Martínez de Salazar Bascuñana

Profesor de Investigación / Research Professor

Dra. Aurora Nogales Ruíz

Investigadora Científica / Research Scientist

Dra. María José Capitán Aranda

Científica Titular / Tenured Scientist

Dr. Victor Luis Cruz Cañas

Científico Titular / Tenured Scientist

Dra. Amelia Linares Dos Santos

Científica Titular (jubilación 31 de diciembre) /

*Tenured Scientist (retired on December 31<sup>st</sup>)*

Dr. Francisco Javier Ramos Díaz

Científico Titular / Tenured Scientist

Dr. Juan Francisco Vega Borrego

Científico Titular / Tenured Scientist

Dr. Gonzalo Santoro Domingo

Investigador Contratado RyC (desde 1 de marzo) / *Contract R&C (since March 1<sup>st</sup>)*Dra. M<sup>a</sup> Teresa Expósito Espinosa

Doctora Vinculada (desde 16 de marzo hasta 31 de julio) /

*Adjoint Researcher (since March 16<sup>th</sup> until July 31<sup>st</sup>)*

D. Andrés Cardil Tornos

Titulado Superior Contratado C/P / University Graduate

D. José Sena Fernández

Contratado Predoctoral FPI / PhD Fellowship

**Personal de apoyo / Support Staff:**

Dr. D. José Carlos Canalda Cámara

Titulado Superior Especializado OPIS / *Specialized University Graduate*

D. Iván Horcajo Peribáñez

Contratado Plan Investigo (desde 16 de octubre) / *Contract (since October 16<sup>th</sup>)*D<sup>a</sup>. Patricia Martínez GarcíaContrato GARJUR - CM / *Contract GARJUR - CM*

Dra. Virginia Souza-Egipsy Sánchez

Titulado Superior Especializado OPIS / *Specialized University Graduate*

## UNIDAD DE GESTIÓN ECONÓMICA-ADMINISTRATIVA FINANCES AND ADMINISTRATION

Dª. Mª Isabel Llerena de Frutos	C. Técnico Especializado de OPI / <i>Specialist Technician OPIs</i>
Dª. Rosario Carrasco Nicolás	C. Ayudante de Investigación de OPIS / <i>Research Assistant OPIs</i>
Dª. Purificación Díez Rodríguez	C. Gral. Admvo. Admon. del Estado / <i>General Admon.</i>
Dª. Alicia Fernández Clavero	C. Ayudante de Investigación OPIS (jubilación 17 de abril) / <i>Research Assistant OPIs (retired on April 17<sup>th</sup>)</i>
Dª. Ana María García Arribas	C. Ayudante de Investigación OPIS / <i>Research Assistant OPIs</i>
Dª. Carmen García Collado	C. Ayudante de Investigación OPIS / <i>Research Assistant OPIs</i>
Dª. Beatriz Gil Sánchez	C. Gral. Admvo. Admon. del Estado / <i>General Admon.</i>
Dª María Salinas Fernández	CFMAC- C. Gral. Admvo. Admón. del Estado / <i>General Admon.</i>

## SERVICIOS DEL CENTRO DE FÍSICA MIGUEL ANTONIO CATALÁN CENTRAL SERVICES

### ALMACÉN / WAREHOUSE

Dª. Clara Isabel Cardeñosa García	C. Gral. Admvo. Admón. del Estado / <i>General Administration</i>
D. José Manuel Segura González	C. Auxiliares Postales de Telecomunicaciones (jubilación 12 de sept.) / <i>Auxiliary Telec. (retired on Sept. 12<sup>th</sup>)</i>
Dª. Soledad Moreno Zambrano	Ayudante Gestión y Servicios Comunes (desde 1 de octubre) / <i>Common Services Assistant (since October 1<sup>st</sup>)</i>

### CONSERJERÍA / RECEPTION

Dª Mª Ángeles Castro de la Puente	Ayudante Gestión y Servicios Comunes / <i>Common Services Assistant</i>
Dª. Soledad Moreno Zambrano	Ayudante Gestión y Servicios Comunes (hasta 30 de sep.) / <i>Common Services Assistant (until 30<sup>th</sup> Sept.)</i>

### INFORMÁTICA / INFORMATICS AND COMPUTER SERVICES

D. Fco. Daniel Rincón Fuentes	Técnico Especializado de OPIS / <i>Technical Specialized OPIs</i>
-------------------------------	---

### MANTENIMIENTO / MAINTENANCE

D. Alberto Flórez Gómez	Oficial Actividades Técnicas y Profesionales (hasta 2 de marzo) / <i>Technical and Prof. Activities Officer (until March 2<sup>nd</sup>)</i>
-------------------------	--

### TALLER MECÁNICO / MECHANICAL WORKSHOP

D. Luis Ángel de Prado Serrano	Ayudante de Investigación de OPIS / <i>Research Assistant OPIs</i>
--------------------------------	--

### TALLER ÓPTICO / OPTICAL WORKSHOP

D. José Lasvignes Pacheco	Técnico Superior de Actv. Técnicas de Mantenimiento y Profesionales / <i>Technical and Professional Activities Technician</i>
---------------------------	---

## **Capítulo 2A**

### **LABOR INVESTIGADORA**

## 2A.1. DEPARTAMENTO DE QUÍMICA Y FÍSICA TEÓRICA

### LÍNEAS DE INVESTIGACIÓN:

- Física Teórica: Gravitación.
- Teoría de la Materia Condensada.
- Física Nuclear Teórica: Estructura y Reacciones.
- Física Molecular Teórica aplicada al estudio de especies astrofísicas y a la caracterización de contaminantes atmosféricos.

### SUBLÍNEAS DE INVESTIGACIÓN:

- Relatividad General Clásica y Cuántica.
- Física de agujeros negros.
- Gravedad cuántica no-local.
- Ondas gravitacionales.
- Sistemas mesoscópicos y fuertemente correlacionados.
- Sistemas cuánticos disipativos.
- 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.
- Espectroscopia teórica de especies moleculares no-rígidas de interés astrofísico y atmosférico.
- Formación de compuestos orgánicos volátiles a partir de radicales orgánicos.
- Fotodisociación de radicales orgánicos.

### TÉCNICAS UTILIZADAS:

- Física teórica y matemática.
- Teoría de campos perturbativa y grupo de renormalización.
- Métodos computacionales.
- Métodos de campo medio autoconsistente.
- Métodos numéricos para la resolución de las ecuaciones de Faddeev en el espacio de coordenadas.
- Desarrollo adiabático en armónicos hiperesféricos.
- Métodos ab initio altamente correlacionados y nuevas herramientas computacionales.

### LABOR INVESTIGADORA:

#### GRAVITACIÓN Y COSMOLOGÍA

##### Cosmología Cuántica de Lazos

El Grupo de Gravitación y Cosmología ha continuado con sus trabajos sobre la aplicación de la Gravedad Cuántica de Lazos a la cosmología, y además ha desarrollado nuevas aplicaciones a la física de agujeros negros. Así, se han estudiado ambigüedades cuánticas que, en el marco de la Cosmología de Lazos, podrían afectar las ecuaciones efectivas que rigen la dinámica de las perturbaciones primordiales en el Universo Primitivo. Estas ambigüedades podrían modificar las consecuencias de la teoría para cantidades cosmológicas observables, tales como el espectro de potencia y las funciones de correlación del fondo de radiación cosmológica. Se ha mostrado cómo fijar las prescripciones de cuantización de manera que se eviten estos problemas. Estos resultados son importantes para dar robustez a las predicciones potencialmente falseables de la Cosmología Cuántica de Lazos. Por otra parte, se han estudiado las propiedades de la masa efectiva de las perturbaciones primordiales en torno al rebote cuántico que ocurre en Cosmología Cuántica de Lazos, cuando el potencial del inflatón es de tipo exponencial o de Starobinsky. Estos dos casos son de especial interés, bien por permitir tratamientos analíticos en inflación (en el primer caso), bien por estar apoyados por las observaciones cosmológicas actuales (en el segundo caso). Se ha demostrado que la masa efectiva es generalmente positiva si se adopta el formalismo de cuantización híbrida en Cosmología Cuántica de Lazos, formalismo que fue propuesto y ha sido elaborado por el Grupo del IEM. Esta positividad

evita la aparición de inestabilidades y permite aplicar criterios de selección del vacío bien desarrollados en Teoría Cuántica de Campos en espaciotiempos curvos.

En lo referente a agujeros negros, el Grupo ha llevado a cabo un análisis completo del modelo efectivo propuesto por Ashtekar, Olmedo y Singh para la geometría de agujeros negros sin rotación en el marco de la Gravedad de Lazos. Las técnicas empleadas en este análisis son totalmente similares a las de Cosmología Cuántica de Lazos, lo que da muestra de su flexibilidad y potencia. Se ha estudiado a fondo la formulación hamiltoniana del modelo, demostrando que es posible una deducción hamiltoniana de su dinámica a costa de introducir un formalismo de dos tiempos para la descripción de la métrica. Se ha discutido la geometría resultante para el interior del agujero negro, mostrando que es aceptable pero que tiene un comportamiento físico muy distinto al esperable según los trabajos de Ashtekar, Olmedo y Singh. Como alternativa, se ha probado que también es posible deducir las mismas ecuaciones dinámicas efectivas si se extiende el espacio de fases del sistema, incluyendo parámetros de cuantización en el mismo. De esta forma, el comportamiento geométrico sí tiene las buenas propiedades descritas en los trabajos originales mencionados. No obstante, la reducción de este sistema extendido a las variables geométricas de partida resulta modificar la estructura canónica. Se han estudiado las soluciones efectivas del modelo, corrigiendo errores de los estudios de Ashtekar, Olmedo y Singh. Una vez conocido el espacio de soluciones y discutida la termodinámica de los agujeros negros en el mismo (que permite temperaturas de Hawking modificadas respecto al caso einsteiniano), se ha pasado a la cuantización por técnicas de Cosmología de Lazos. De esta forma se ha obtenido por vez primera un modelo cuántico de agujeros negros sin rotación en el marco de Gravedad de Lazos con buenas propiedades efectivas. Se han determinado los estados físicos del sistema y se ha mostrado que se recupera un buen comportamiento para estados con masa del agujero negro grande. Estos resultados pueden abrir una nueva vía de estudio para agujeros negros cuánticos y el análisis de su radiación gravitatoria, con aplicaciones a ondas gravitacionales emitidas en las últimas fases de sucesos de coalecencia.

### **Gravedad cuántica no-local**

El Grupo de Gravitación y Cosmología es uno de los más activos a nivel internacional en el estudio de la gravedad cuántica no-local, tanto con operadores asintóticamente polinomiales como con operadores fraccionarios. Se trata de teorías de campos perturbativas unitarias y renormalizables. El avance principal en 2022 para la teoría con operadores asintóticamente polinomiales ha sido la construcción de un escenario del universo primitivo alternativo a la inflación cósmica, que resuelve los problemas del modelo de la gran explosión caliente y predice una ratio de los espectros tensor a escalar tan alta que se podrá observar dentro de tan solo cinco años por BICEP Array. Se trata de una predicción directa de la gravedad cuántica única en la literatura. Por lo que respecta a la gravedad fraccionaria, enfoque propuesto por el Grupo a partir de 2010 y avanzado crucialmente en 2021, por un lado, se ha propuesto un modelo que permite explicar la curva de rotación de las galaxias mediante efectos de la geometría, sin necesidad de introducir materia oscura. Al mismo tiempo, se ha formulado una teoría de gravedad cuántica completa y demostrado que es unitaria y renormalizable. Con ese fin, se ha desarrollado un formalismo novedoso para tratar configuraciones generales de puntos de ramificación en el plano complejo. Gracias a estos resultados, la teoría fraccionaria está recibiendo un interés creciente en la comunidad científica. Por último, una revisión multiautor de la fenomenología de la gravedad cuántica publicada en 2022 ya ha recibido más de 160 citas.

### **Ondas gravitacionales**

El Grupo de Gravitación y Cosmología es uno de los grupos externos del Consorcio LISA y cuenta con un miembro pleno y uno asociado, más un asociado externo. En mayo de 2022, la misión LISA ha entrado oficialmente en la fase B1 de desarrollo según la nomenclatura ESA, que acarrea un trabajo más intenso para definir precisamente los objetivos científicos de la misión. Se han publicado dos “artículos blancos” en Living Reviews in Relativity que ya han recaudado más de 120 citas. En otro artículo de la colaboración, preparado para uno de los Work Package, se han estudiado ondas gravitacionales en modelos de gravedad alternativa con velocidad de propagación dependiente del momento.

### **Métodos geométricos en gravitación**

Una parte del Grupo de Gravitación y Cosmología (Fernando Barbero y sus colaboradores de la Universidad Carlos III y Memorial University, Saint John) ha continuado con la aplicación de métodos geométricos al estudio de la formulación hamiltoniana de teorías de campos, en particular las relacionadas con la relatividad general. A lo largo del año, han utilizado tanto enfoques canónicos como covariantes para estudiar teorías de campos en variedades con fronteras. También han discutido la abelianización de teorías gravitatorias como un primer paso hacia su posible cuantización perturbativa. Finalmente, han iniciado un programa de trabajo para comprender los problemas de regularización de las teorías cuánticas de campos mediante la introducción de espacios funcionales apropiados y el aprovechamiento de sus estructuras matemáticas.

Con respecto al uso de métodos hamiltonianos covariantes para teorías de campos con fronteras, se han ampliado los resultados conocidos sobre la equivalencia de algunas teorías gravitatorias para incluir la no metrictad y la torsión en variedades con fronteras de tipo tiempo, tanto en la fórmula métrica como en la de tétradas. En particular se ha probado la equivalencia de sus espacios de soluciones con el que se obtiene a partir de la acción de Palatini. Utilizando el complejo bicomplejo relativo, se ha demostrado que las Lagrangianas de Palatini y Holst generalizadas tienen cargas y espacios de fase

covariantes equivalentes. También se han utilizado métodos similares para estudiar algunas teorías de campos que juegan un papel importante en la física de la materia condensada, en particular el modelo de Maxwell-Chern-Simons.

Un enfoque interesante sugerido en 1992 por Smolin y recientemente reconsiderado por otros autores (Varadarajan, Thiemann et. al.) sugiere una vía para la cuantización de la gravedad que se basa en la acción autodual abelianizada para Relatividad General. La idea básica es usarla (en caso de que sea resoluble) como punto de partida para un planteamiento perturbativo. Como forma de obtener más información sobre las aplicaciones prácticas de dicho método, se han estudiado varias acciones (Cartan-Palatini, Holst, Husain-Kuchař y la acción autodual) para comprobar si son deformaciones consistentes de sus contrapartidas abelianizadas. El trabajo realizado muestra que las acciones autodual y de Husain-Kuchař funcionan bien en este sentido, mientras que la acción de Palatini o la de Holst son patológicas (por ejemplo, sus versiones abelianizadas no tienen grados de libertad locales).

Finalmente, se ha discutido el cálculo de corchetes de Poisson para teorías de campos descritas en entornos funcionales bien controlados (espacios de Sobolev) y mostrado que muchos problemas que surgen en las formulaciones estándar son consecuencia del uso de definiciones inapropiadas de las derivadas funcionales. En este sentido, es muy importante una comprensión cuidadosa del concepto de función diferenciable.

## TEORÍA DE LA MATERIA CONDENSADA

### Ruptura de simetría y superconductividad en multicapas de grafeno giradas

La observación de superconductividad en multicapas de grafeno giradas ha sido uno de los descubrimientos más notables en estos años recientes, en el contexto de la física de la materia condensada. Este fenómeno fue visto por primera vez en las bicapas de grafeno giradas, en el así llamado ángulo mágico de giro, pero ha mostrado ser un efecto robusto en sistemas con mayor número de capas, al haber sido observado también en tricapas, cuadricapas, y pentacapas de grafeno giradas. A este respecto, hemos desarrollado un método numérico en espacio real basado en la aproximación de Hartree-Fock con la finalidad de describir las propiedades electrónicas de estos sistemas, poniendo el foco en las fases con ruptura de simetría y su relación con la superconductividad encontrada en el ángulo mágico.

Hemos diseñado un método de cálculo autoconsistente en el que los autovalores y autovectores del propagador del electrón (en la aproximación estática) se obtienen mediante una iteración recursiva de la aproximación de Hartree-Fock. Hemos encontrado que este esquema de cálculo muestra buena convergencia en espacio real, a pesar del gran número de átomos de carbono contenidos en la celda unidad de las multicapas giradas de grafeno en el ángulo mágico. El método nos ha permitido determinar los diagramas de fases de las bicapas, tricapas, y cuadricapas de grafeno giradas, que muestran aspectos muy similares como la presencia ubicua de una fase con ruptura de la simetría de valle, acompañada por la ruptura de la simetría de inversión temporal.

Hemos desvelado un mecanismo universal de anclaje de valle y espín en las multicapas de grafeno giradas por el que los dos sectores con diferente proyección de espín muestran signos opuestos de la polarización de valle. Esto conduce a un estado fundamental en el que las dos proyecciones de espín se localizan preferentemente en valles opuestos, con la consecuencia de que el sistema electrónico puede desarrollar una superconductividad de tipo Ising, con los espines apuntando en la dirección normal al plano de las capas. Hemos avanzado la idea de que este mecanismo puede explicar la observación de superconductividad en las multicapas giradas bajo campos magnéticos planares de magnitud inusualmente elevada. Además, hemos demostrado que el fenómeno de la ruptura de la simetría de valle confiere una fuerte anisotropía a las bandas electrónicas de baja energía, conduciendo a una interacción efectiva que puede ser atractiva en ciertos canales. Hemos construido así un marco unificado que puede dar cuenta de aspectos esenciales de la superconductividad en las bicapas, tricapas, y cuadricapas giradas de grafeno, poniendo de relieve el fenómeno de ruptura dinámica de simetría tal y como es capturado en nuestra aproximación autoconsistente de Hartree-Fock.

### Sistemas cuánticos disipativos

Estudiamos un modelo de un espín colectivo cuántico débilmente acoplado a un entorno markoviano polarizado. Este modelo tiene aplicaciones en electrodinámica cuántica de cavidades, granos magnéticos sobre una superficie metálica y circuitos superconductores cuánticos. Encontramos que el espectro se divide en dos regiones que llamamos fases espectrales normales y excepcionales del Liouvilliano. En el límite termodinámico, la fase espectral excepcional presenta la propiedad única de estar formada exclusivamente por puntos excepcionales de segundo orden. Como consecuencia, la evolución de cualquier matriz de densidad inicial que puebla esta región se ralentiza y no puede describirse mediante una combinación lineal de decaimientos exponenciales. Esta fase está separada de la fase normal por una línea crítica en la que la densidad de valores propios del Liouvilliano diverge, un fenómeno análogo al de las transiciones de fase cuánticas de estado excitados observadas en algunos sistemas cuánticos cerrados. En el límite de polarización sin baño, esta criticidad se transfiere al estado estacionario, lo que implica una transición de fase cuántica disipativa y la formación de un cristal de tiempo. Demostramos así que el modelo, aunque se puede resolver exactamente, presenta una fenomenología excepcionalmente rica.

## Aislantes topológicos magnéticos

Hasta ahora se ha realizado un estado de Hall anómalo cuántico con un alto número de Chern en estructuras multicapa que consisten en capas alternas de aislante topológico (TI) magnético y no dopado. Sin embargo, en propuestas anteriores, el número de Chern solo se puede ajustar variando la concentración de dopaje o el ancho de las capas magnéticas de TI. Este inconveniente restringe en gran medida las aplicaciones de corrientes de borde quirales sin disipación en electrónica, ya que el número de canales conductores permanece fijo para cada muestra. En este artículo, proponemos una forma de variar el número de Chern a voluntad en estas estructuras multicapa por medio de un campo eléctrico externo aplicado a lo largo de la dirección de apilamiento. En presencia de un campo eléctrico en la dirección de apilamiento, las bandas invertidas de la estructura no polarizada se fusionan e hibridan, generando nuevas bandas invertidas y colapsando las previamente invertidas. De esta forma, el número de estados de Chern se puede sintonizar externamente en la muestra, sin necesidad de modificar el número y ancho de las capas o el nivel de dopaje. Mostramos que este efecto se puede identificar experimentalmente por la variación de la conductancia transversal en función del campo eléctrico a energía de inyección constante en el nivel de Fermi.

## FÍSICA NUCLEAR TEÓRICA

### Desintegración beta en isótopos impares de mercurio deficitarios en neutrones

Se han estudiado teóricamente las propiedades globales y de desintegración de isótopos impares de mercurio deficitarios en neutrones (183-187Hg). El estudio incluye tanto las desintegraciones de los estados fundamentales como las correspondientes de los estados isoméricos. Se comienza utilizando un formalismo deformado de campo medio autoconsistente con fuerzas de Skyrme y se calculan las diferentes formas nucleares de equilibrio a que dan lugar. Para cada una de estas formas y para diferentes estados posibles del nucleón impar se evalúan los radios cuadráticos (m.s.) de carga y los momentos dipolares magnéticos para los que existe información experimental, obteniendo en general un buen acuerdo con el experimento. Los m.s. en esta región de masa de la cadena isotópica de mercurio están caracterizados por discontinuidades en los vecinos par-impar, siendo mayores en los isótopos 183Hg y 185Hg. Este efecto se interpreta como una alternancia entre formas proladas y obladas de equilibrio, resultando que la información sobre núcleos impares es compatible con estados fundamentales prolados mientras que los vecinos pares serían oblados.

Posteriormente se introducen fuerzas residuales de tipo espín-isospín tratadas en aproximación pnQRPA para evaluar las distribuciones energéticas de la intensidad Gamow-Teller (GT) y las vidas medias de desintegración beta+/EC. La interpretación teórica de estos resultados es un problema complejo dado que tanto el núcleo progenitor como el hijo se hallan inmersos en regiones transicionales en las que las formas nucleares cambian rápidamente entre vecinos y que pueden estar mezcladas en cada isótopo concreto. En cualquier caso, las distribuciones de GT que se espera sean medidas en un futuro próximo en ISOLDE/CERN mediante técnicas espectroscópicas de absorción total de rayos gamma, contienen información que permitirá discernir entre diferentes formas nucleares y entre las posibles caracterizaciones de espín y paridad de los estados, fundamental o isomérico, que sufren la desintegración beta+/EC.

### Interpretación teórica de la desintegración de 70Kr

Medidas recientes de la desintegración beta con emisión de positrones en el núcleo 70Kr realizadas en RIKEN (Japón) han sido analizadas en términos de un modelo de estructura nuclear basado en cálculos de campo medio autoconsistente con interacciones de Skyrme y correlaciones QRPA y de apareamiento. La desintegración de este núcleo es de gran interés ya que se trata del núcleo más pesado estudiado experimentalmente que decae en un núcleo con  $N=Z$  (70Br) y por tanto es especialmente sensible a la simetría de isospín y al no bien conocido pairing protón-neutrón (pn). La existencia de un pairing pn en el canal de acoplamiento  $T=0$  se espera que conduzca a un incremento de la intensidad Gamow-Teller a baja energía. Su estudio es también importante desde el punto de vista de la propia estructura nuclear al producirse en una región de masa caracterizada por cambios drásticos en la forma del núcleo con coexistencia de formas nucleares y en la que la introducción de la deformación nuclear es crucial para una correcta interpretación de los datos experimentales.

Los resultados teóricos muestran un buen acuerdo con los datos experimentales en la distribución energética de la intensidad Gamow-Teller medida. No obstante, la interpretación en términos de configuraciones nucleares obladas o proladas, no arroja luz sobre cuál es preferida por el experimento, siendo ambas razonablemente buenas.

En comparación con la desintegración del núcleo 62Ge que era el núcleo con desintegración en  $N=Z$  (62Ga) más pesado medido hasta la fecha, se observa un claro incremento de la intensidad GT al estado  $1^+$  más bajo en energía que indicaría la recuperación parcial de la simetría SU(4).

### Competición entre desintegraciones alfa y beta en núcleos superpesados

Se han estudiado sistemáticamente las desintegraciones débiles en núcleos superpesados a lo largo de cadenas de desintegración alfa que surgen tras la síntesis de núcleos con  $Z=119$  y  $Z=120$ . La descripción microscópica de la estructura

nuclear de estos núcleos que da lugar a la desintegración beta+ y capturas electrónicas se realiza mediante cálculos pnQRPA basados en fuerzas de Skyrme y campos medios deformados de tipo Hartree-Fock. Los resultados se comparan con las desintegraciones alfa que compiten con ellas y que se evalúan mediante expresiones fenomenológicas ajustadas a los datos experimentales.

Se observa que la desintegración alfa en esos núcleos es dominante en la mayoría de los casos, pero aparecen casos de especial importancia en los que las vidas medias son comparables lo que abre la posibilidad de nuevas rutas hacia regiones de isótopos más ricos en neutrones y más cercanas a las islas de estabilidad predichas en esta región de núcleos superpesados.

Se encuentra que la desintegración beta incrementa su importancia relativa a medida que se reduce el número atómico ( $Z < 108$ ) dentro de una cadena de desintegración dada, así como cuando nos movemos en la dirección de las cadenas con una diferencia entre neutrones y protones menor ( $N - Z < 55$ ). De hecho, se han identificado regiones de especial interés en las que la desintegración beta+/EC es más rápida que la correspondiente desintegración alfa.

### **Confinamiento de sistemas de dos y tres partículas por medio de un campo externo**

A lo largo de este año hemos utilizado el denominado “d-method”, recientemente desarrollado, y que permite investigar sistemas de dos y tres cuerpos bajo la influencia de un potencial de confinamiento externo. El punto de partida de este procedimiento consiste en tomar la dimensión  $d$  como un parámetro que puede variar de forma continua desde  $d=3$  hasta  $d=2$ . El efecto del potencial de confinamiento queda entonces contenido en la barrera centrífuga de potencial, que presenta una dependencia en la dimensión. Este método es preciso y correcto en los dos límites, es decir, para  $d=3$  y  $d=2$ .

En particular, para sistemas de dos cuerpos, hemos investigado funciones de onda, defasajes y secciones eficaces elásticas. La interacción entre los dos cuerpos se ha tomado de corto alcance. Usando un potencial de pozo cuadrado, hemos derivado expresiones analíticas para longitudes de dispersión y defasajes. Hemos introducido también la dimensión crítica,  $d_E$ , que se corresponde con el escenario en el que la longitud de dispersión de la interacción es infinita. Esta situación es particularmente interesante, ya que, cuando se añade una tercera partícula, se cumplen las condiciones para la aparición de estados de Efimov. Hemos investigado también la equivalencia entre las funciones de onda obtenidas en el espacio de dimensión  $d$  y la correspondiente al espacio tridimensional ordinario confinado. Hemos demostrado que los defasajes son los mismos en ambos casos. En consecuencia, el método  $d$  se puede utilizar para obtener secciones eficaces elásticas de dos cuerpos a baja energía ante la presencia de un campo externo.

Siguiendo el mismo esquema, hemos investigado también el caso de los sistemas de tres cuerpos, centrandonos en estructuras en el continuo de tres partículas que interactúan en un campo externo deformado. Nos enfocamos en dimensiones cercanas a la dimensión crítica,  $d = d_E$ , entre 2 y 3, para la cual la energía de los subsistemas de dos cuerpos es igual a cero. Estas son de nuevo las condiciones bajo las cuales puede aparecer el efecto Efimov. En este escenario,  $d=d_E$ , hemos diseñado un modelo de tres cuerpos esquemático, realista a largas distancias, basado en potenciales de pozo cuadrado para la interacción partícula-partícula. Así, hemos derivado expresiones analíticas para las funciones de onda, longitudes de dispersión, defasajes y secciones eficaces elásticas. El procedimiento y los resultados son universales, válidos para todos los potenciales de corto alcance siempre que las longitudes de dispersión suficientemente grandes. Hemos discutido también las propiedades y la validez de las expresiones derivadas considerando el sistema más simple, como es el de tres bosones idénticos. Hemos encontrado que las expresiones encontradas son particularmente útiles para energías muy pequeñas, donde los cálculos numéricos completos a menudo no son factibles. Para energías en las que se pueden realizar cálculos numéricos, se encuentra una buena concordancia con los resultados analíticos. Estos resultados del modelo pueden probarse mediante experimentos de dispersión para tres partículas en un potencial de oscilador deformado externo equivalente. Todas las secciones eficaces van a cero en el límite de energía cero para  $d < 3$  como una potencia de la energía dependiente de  $d$ .

### **Desintegración beta en núcleos con halo de dos neutrones**

A lo largo de este año hemos investigado también la desintegración beta de núcleos con halo de dos neutrones. Más concretamente, hemos desarrollado un método de pocos cuerpos novedoso y práctico que está formulado para incluir simetría de isospín. El método está diseñado para describir la desintegración beta, donde el concepto básico de simetría de isospín facilita una comprensión adecuada. Se tratan tanto los estados isobáricos análogos como los anti-análogos. Hemos derivado fórmulas generales y explícitas para sistemas de tres cuerpos usando coordenadas hiperesféricas. La desintegración beta del  $^{11}\text{Li}$  ( $^9\text{Li} + \text{n} + \text{n}$ ) se toma como primera aplicación, ya que tiene un gran interés práctico, al existir ya datos experimentales acerca de la misma. Los resultados detallados se comparan con los datos experimentales existentes y se encuentra una buena concordancia a altas energías, donde están situados los estados isobárico análogo y anti-análogo en el núcleo hijo. Se sugiere una interpretación del patrón de decaimiento a energías de excitación más bajas. Las desintegraciones del  $^9\text{Li}$  y los dos neutrones del halo se tratan individualmente, llevando a un núcleo hijo con un isospín bien definido. Sin embargo, predecimos que los estados isobárico análogo y el anti-análogo pueden estar mezclados en un 0.4% aproximadamente. Las propiedades predichas para los productos de la desintegración pueden constituir buenos tests futuros para el modelo aquí desarrollado.

## FÍSICA MOLECULAR TEÓRICA APLICADA AL ESTUDIO DE ESPECIES ASTROFÍSICAS Y A LA CARACTERIZACIÓN DE CONTAMINATES ATMOSFÉRICOS

La taréa de investigación realizada en 2022 se inserta en el proyecto H2020-MSCA-RISE-2019-ATMOS-872081 “*Pollutants and greenhouse gases in the atmosphere - understanding gas-gas and gas-solid interactions towards a cleaner atmosphere* (ATMOS)”. Este proyecto se coordina desde el instituto de Estructura de la Materia y desde el grupo de Química Teórica del Departamento de Química y Física Teóricas en colaboración con la Unidad Asociada con la Universidad de Huelva (Fig.1).

ATMOS es una red internacional financiada por una Acción Marie Curie para el inercambio de investiagores (RISE). El objetivo principal es el estudio de problemas científicos relacionados con los elementos de contaminación atmosférica, con énfasis en la formación de estudiantes graduados en ciencias atmosféricas. La red está compuesta por once grupos científicos y 31 científicos senior. Dentro de este entorno, varios estudiantes procedentes de los grupos integrados en ATMOS han visitado el IEM-CSIC.

ATMOS se centra en especies abundantes ( $O_3$ , HCHO,  $HO_2$ ,  $NH_3$ , ...), especies orgánicas volátiles oxigenadas (OVOC's) y radicales que no se están caracterizado completamente previamente. Básicamente, el trabajo científico de los participantes del IEM se refiere a la identificación y reactividad de los radicales orgánicos y de los OVOC's que presentan rotación interna. La comprensión de los procesos que involucran compuestos orgánicos en la atmósfera depende de su identificación y caracterización. El modelado espectroscópico cuantitativo línea por línea en el rango infrarrojo (IR) es necesario para las observaciones atmosféricas actuales y futuras con instrumentos de gran escala. Por lo tanto, para entender los efectos en la atmósfera, se necesitan parámetros estructurales y espectroscópicos de tales especies moleculares. Estos estudios requieren un gran esfuerzo científico centrado en la caracterización de especies conocidas y nuevas y en el conocimiento de la evolución química de las fuentes de fase gaseosa, de los procesos fotoquímicos inducidos y los ciclos radicales. En el IEM, la herramienta principal para la caracterización molecular son los cálculos ab initio altamente correlacionados, así como los códigos Originales de Fortran para la determinación de propiedades espectroscópicas.

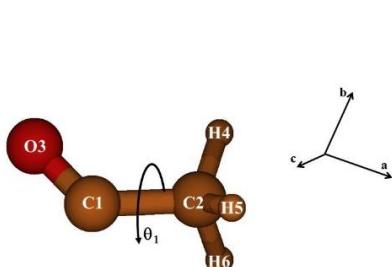


Fig 1

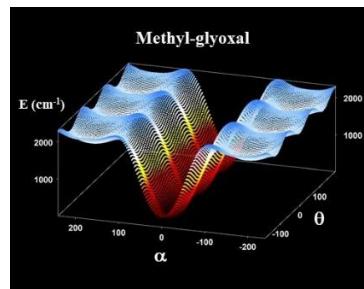


Fig 2

Otro objetivo de ATMOS es el estudio de la reactividad. Los contaminantes orgánicos atmosféricos pueden actuar como precursores de las reacciones químicas que pueden producir radicales libres. El estudio de los ciclos radicales atmosféricos presenta desafíos importantes, ya que los ciclos radicales no se entienden bien. Los estudios sistemáticos de los gases orgánicos precursores y sus propiedades son vitales. Aunque muchos procesos involucran sólo a los estados electrónicos fundamentales, algunos procesos radicales de formación y disociación implican excitación electrónica en los rayos UV y regiones visibles, la identificación de los estados electrónicos disociativos y de Rydberg requiere colaboración entre los experimentos y la teoría. Las herramientas para la reactividad son cálculos ab initio altamente correlacionados, teoría funcional de densidad y códigos Fortran para la determinación de las tasas cinéticas.

Durante 2022, en el IEM-CSIC. Se han calculado propiedades espectroscópicas y estructurales, con un énfasis en la rotación interna de grupos metilo, varias cetonas que están clasificadas como Compuesto Orgánicos Volátiles (COVs) y varios radicales orgánicos que se pueden considerar fragmentos de dichas cetonas (Fig 1) y pueden participar en procesos reactivos. Estas moléculas contribuyen a un incremento del ozono troposférico y, por lo tanto, se vigilan como contaminantes. De esta manera, se han estudiado la acetona, el biacetilo, los radicales acetio y vinilo, el metil gioxal (Fig 2), la metil vinil cetona, la metil etil cetona, además de algunos alcoholes (alcohol isopropílico, metoximetanol) y algunos peróxidos ( $CH_3COOOH$ ,  $CH_3OOCH_3$ ).

## 2A.2. DEPARTAMENTO DE ESPECTROSCOPÍA NUCLEAR, VIBRACIONAL Y DE MEDIOS DESORDENADOS

### LÍNEAS DE INVESTIGACIÓN:

- Espectroscopía intensificada por superficies (SERS, SEF and SEIRA) de sistemas moleculares.
- Nanosensores.
- Técnicas espectroscópicas aplicadas al estudio de materiales de interés en el Patrimonio Cultural.
- Diseño de ecomateriales.
- Análisis toxicológico mediante técnicas espectroscópicas.
- Nano-Fotónica.
- Plasmónica y Metamateriales.
- Sistemas carentes de orden de largo alcance.
- 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.
- Estudio de hiper-materia exótica.
- Métodos de seguimiento de partículas y vértices.
- Investigación sobre machine learning and deep learning a la espectroscopia nuclear experimental.
- Simulaciones por computación usando la herramienta FairRoot para experimentos de Física Nuclear.

### SUBLÍNEAS DE INVESTIGACIÓN:

- Caracterización de biomoléculas adsorbidas en nanoestructuras mediante espectroscopías asistidas por plasmones.
- Detección de contaminantes mediante SERS.
- Análisis de colorantes y pigmentos mediante espectroscopía vibracional convencional y espectroscopías vibracionales intensificadas por superficie.
- Cálculos teóricos de espectros vibracionales por métodos de teoría de funcionales de densidad.
- Estudios *in situ* de caracterización de materiales.
- Cementos sostenibles.
- Patrimonio subacuático.
- Análisis de materiales arqueológicos por espectroscopía micro-Raman.
- Análisis de huesos basada en la aplicación de técnicas espectroscópicas, Micro-Raman y Micro-FTIR.
- Nanofabricación y funcionalización de nanoestructuras plasmónicas.
- Resonancias plasmónicas en nanoestructuras metálicas (nanoantenas).
- Metamateriales con materiales dieléctricos de alto-índice.
- Metamateriales metálicos transparentes.
- Plasmónica topológica.
- Comportamiento físico a nano-escalas.
- Estructura y dinámica microscópica de materia condensada desordenada.
- 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.
- Espectroscopía en vuelo de hipernúcleos ligeros e hipernúcleos exóticos.
- Espectroscopía de núcleos unidos al mesón.
- I + D en seguimiento y reconstrucción de partículas en física nuclear de altas energías.
- I+D en detectores de micro-vértice.

## TÉCNICAS UTILIZADAS:

- Espectroscopía Raman Dispersiva.
- Espectroscopía Raman por Transformada de Fourier (FT-Raman).
- Espectroscopía Raman portátil.
- Espectroscopía IR por transformada de Fourier (FTIR).
- Reflectancia total atenuada de infrarrojo (ATR).
- Espectroscopía de Fluorescencia.
- Fluorescencia de Rayos X (XRF).
- Difracción de Rayos X (DRX).
- Microscopía electrónica de transmisión (TEM).
- Microscopía electrónica de barrido (SEM).
- Fluorescencia de rayos X por energía dispersiva (EDX).
- Microscopía óptica (MO).
- Microscopía de Campo Oscuro (DFM)
- Análisis térmico (ATD/TG).
- Resonancia Magnética Nuclear (RMN).
- Física Teórica y Matemática.
- Métodos computacionales.
- Simulación Numérica.
- Dispersión de neutrones.
- Medidas de Adsorción de gases.
- Desintegración beta de núcleos exóticos producidos por el método ISOL en la instalación ISOLDE.
- 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.
- Espectroscopía Gamma.
- Análisis de experimentos en Física Nuclear Experimental.
- Métodos computacionales.
- Espectroscopía de hipernúcleos en colisiones de iones.
- Algoritmos de reconstrucción de trayectorias y vértices.
- Arquitecturas de deep learning de Pytorch para trayectoria de partículas.
- Métodos computacionales.
- Simulación Numérica.
- Dispersión de neutrones.

## LABOR INVESTIGADORA:

### DISEÑO DE NANOSENSORES PARA DETECCIÓN DE CONTAMINANTES

El diseño de sensores con nanoestructuras ha sido continuado como uno de los principales objetivos del trabajo experimental de nuestro grupo durante el año 2022. Estos sensores requieren la síntesis de nanoestructuras con propiedades ópticas avanzadas. La interacción de luz de una longitud de onda apropiada con nanopartículas (NPs) conduce a una alta intensificación del campo eléctrico local, que es el principio fundamental en el que se basa la detección molecular mediante Raman y fluorescencia intensificada por nanoestructuras. En los últimos años hemos desarrollado diversos métodos de síntesis de nanopartículas con interesantes aplicaciones en espectroscopía y catálisis. Entre estas nanopartículas se encuentran las nanoestrellas de plata, sistemas éstos que presentan propiedades morfológicas específicas conducentes a altas intensificaciones del campo electromagnético. El uso de estas nanoestrellas se ha generalizado para el diseño de sensores SERS altamente eficaces para la detección de numerosas sustancias de interés medioambiental y biológico, así como pigmentos de interés para el Patrimonio Cultural.

Asimismo, el diseño de nanosensores implica una modificación de las propiedades físico-químicas de las nanopartículas mediante la funcionalización de las mismas. Esta funcionalización puede conseguirse mediante autoensamblaje de moléculas orgánicas sobre las nanoestructuras, lo que permite incrementar la sensibilidad y selectividad de las nanoestructuras fabricadas, dando como resultado superficies de alto rendimiento al combinar las propiedades físicas del metal con las propiedades químicas de moléculas orgánicas autoensambladas sobre ellas. En este sentido, se aplicaron diversas estrategias de funcionalización basadas en el uso de: a) calixareno; b) ciclodextrinas y c) moléculas con estructura cruciforme.

Los calixarenos se caracterizan por poseer una cavidad interna dentro de la cual se pueden alojar moléculas difíciles de detectar por espectroscopía Raman intensificada por nnanoestructuras (SERS). Durante 2022 se continuó con el uso de nuevas

generaciones de calixarenos caracterizadas por presentar en su estructura diferentes puntos de unión con las superficies metálicas. Estos nuevos ensambladores se probaron en la detección de contaminantes emergentes como el dioxano, el glifosato y sustancias perfluoradas. Estos estudios se realizaron en el marco de la cooperación que nuestro grupo mantiene con investigadores de la Universidad PJ Safarik de Kosice (Eslovaquia) y con la empresa Safta Photonics. Esta última empresa ha licenciado la patente desarrollada por nuestro grupo en la detección de contaminantes emergentes mediante SERS y estamos en vías de generar otras patentes para la detección de glifosato.

Las ciclodextrinas se han empleado también en la funcionalización de nanopartículas para la detección de trazas de otro tipo de contaminantes emergentes como son los bisfenoles. Las ciclodextrinas empleadas a tal fin necesitan incorporar en su estructura grupos tioles (-SH) que permiten en anclaje de la macromolécula sobre la superficie del metal. Al igual que los calixarenos, estas moléculas presentan una cavidad interna con características diferentes que permiten la interacción con moléculas de difícil adsorción sobre metales.

Finalmente, las moléculas cruciformes, son sustancias sintéticas que presentan dos puntos de unión con los metales y una estructura aromática en la parte intermedia. Este tipo de moléculas actúan ensamblando dos nanopartículas, generando puntos de alta intensificación de campo, o hot spots, por lo que desempeñan la doble función de activar las nanopartículas por ensamblaje de las mismas, y la captación del contaminante que viene a colocarse justamente en la zona de alta intensificación. Esta estrategia permite aumentar considerablemente la sensibilidad y la especificidad de la detección por SERS. La disponibilidad de estos ensambladores cruciformes ha sido posible gracias a la colaboración con investigadores de la Pontificia Universidad Católica de Valparaíso, quienes han sintetizado varias de estas moléculas con diferentes estructuras incluyendo en su estructura residuos de piridina y tiofeno, grupos éstos capaces de adherirse fuertemente a la superficie del metal.

Asimismo, se están diseñando en nuestro grupo nuevas metodologías de fabricación de nanopartículas plasmónicas para ser empleadas en la detección de contaminantes emergentes del tipo fenoxi, tales como MCPA y 2,4-D, para los que una modificación de nanopartículas fabricadas con citrato mejora enormemente su aplicabilidad.

## EFEKTOS PLASMÓNICOS Y ANÁLISIS DE BIOMOLÉCULAS

La excitación de plasmones en metales nanoestructurados, fundamentalmente plata y oro, pueden ser empleados en el estudio de biomoléculas. Este tipo de análisis permite una caracterización de biomoléculas a concentraciones fisiológicas, lo que permite la caracterización de las mismas a concentraciones parecidas a los medios biológicos en donde éstas se encuentran.

Los efectos plasmónicos analizados han sido los siguientes: a) resonancia de plasmones superficiales localizados (LSPR); b) hibridación interpartícula de plasmones, manifestada a través de procesos de agregación de nanopartículas; y c) la intensificación de campo eléctrico inducida fundamentalmente en los puntos de máxima intensificación de campo localizados en espacios interpartículas o gaps, y en puntas generadas en nanopartículas de morfología anisotrópica. Este último efecto es el responsable del efecto SERS.

Estos efectos presentan una prometedora aplicación en el campo de la biofotónica. Durante el 2022 se han empleado diferentes sustratos metálicos para llevar a cabo el estudio de la adsorción de péptidos sobre nanopartículas, en particular oligopéptidos empleados en la fabricación de prótesis, y otros de gran trascendencia en medicina como los amiloides beta y péptidos de diseño empleados para la biofuncionalización de superficies con el objetivo de diseñar sensores biológicos capaces de detectar la presencia de agentes patógenos.

Durante el año 2022 se ha iniciado una nueva línea de investigación basada en el empleo de nanopartículas plasmónicas para el análisis de sistemas biológicos complejos. Se ha comenzado el estudio de líquenes y hongos de diferentes especies. Los primeros resultados son bastante prometedores en la aplicación de la técnica SERS en la identificación de diferentes tipos de especies fúngicas. Otra aplicación que se ha llevada a cabo del SERS es la detección de sustancias toxicológicas como la bufetamina, así como el estudio de moléculas polifenólicas existente en tejidos vegetales tales como las agallas de robles.

Otra interesante aplicación de los efectos plasmónicos ha sido la detección de biomoléculas en materiales biológicos y arqueológicos sin necesidad de su extracción de los materiales matriz, lo que permite desarrollar un método de análisis in situ que preserva los materiales de origen. Esta metodología se ha aplicado en el caso de la detección del pigmento natural ácido carmínico, elemento esencial en el colorante carmín, en textiles arqueológicos provenientes del norte de Chile. En este tipo de materiales se han empleado nanopartículas de plata con forma de estrella, ya que generan una intensificación del campo superior al de las nanoesferas. El análisis pormenorizado del colorante carmínico en fibras textiles de lana ha revelado también la presencia de material biológico procedente de las cochinillas, insectos a partir de los cuales se extrae el colorante rojo carmín. Concretamente se detectaron bases de nitrógeno características de los ácidos nucleicos de estos insectos.

Las nanoestrellas de plata se han empleado también en la detección de ácido carmínico en materiales biológicos como las plumas de aves. Esta investigación se ha llevado a cabo en plumas de *Regulus calendula*, una especie de pájaro con una cresta de plumas rojas en su cabeza. El empleo de nanopartículas con forma de estrella ha revelado la presencia de ácido carmínico

en plumas de su cresta, lo que indica que el colorante se adquiere a través de la dieta de este pájaro a base de insectos cochinilla durante sus períodos migratorios en América del Norte. Esta investigación se ha llevado a cabo gracias a una colaboración con investigadores de la Universidad de California Los Angeles (UCLA).

## TÉCNICAS ESPECTROSCÓPICAS APLICADAS AL ESTUDIO DEL PATRIMONIO CULTURAL

Durante el año 2022 se ha continuado con la investigación de las tintas ferrogálicas presentes en manuscritos antiguos con el fin de realizar una discriminación de los diferentes tipos de tintas empleadas en un mismo documento o documentos similares, en donde diferentes tintas empleadas por varias personas pueden ser analizadas. Los principales objetivos de este trabajo han sido: a) discriminación de tintas ferrogálicas en manuscritos escritos en la misma época mediante el uso de espectroscopía Raman, infrarroja y XRF; b) identificación y asignación de los marcadores espectrales Raman de escrituras similares y su correspondencia con la estructura química de los componentes; c) valoración del efecto del envejecimiento sobre las señales espectrales con el fin de encontrar marcadores temporales, que puedan contribuir a conocer la antigüedad aproximada de las escrituras y las posibles modificaciones posteriores que se realicen en los manuscritos a lo largo del tiempo. Este trabajo se está completando con la fabricación de tintas ferrogálicas en nuestro laboratorio siguiendo las recetas encontradas en manuscritos antiguos, para su posterior comparación con las tintas de manuscritos históricos.

Durante este año se ha profundizado en el análisis de los complejos de hierro y cobre con diferentes sustancias polifenoles existentes en las tintas ferrogálicas, y se ha desarrollado un estudio teórico basado en el análisis de los modos vibracionales de diferentes complejos de hierro de estos polifenoles para ayudar en la interpretación de los espectros vibracionales de estas sustancias de gran importancia para el Patrimonio Cultural dada su presencia en manuscritos históricos. Los resultados resultantes de esta investigación, ayudarán al análisis de manuscritos históricos que se pretende realizar en un futuro en la Biblioteca Nacional de Madrid y la Biblioteca del Palacio Real de Madrid.

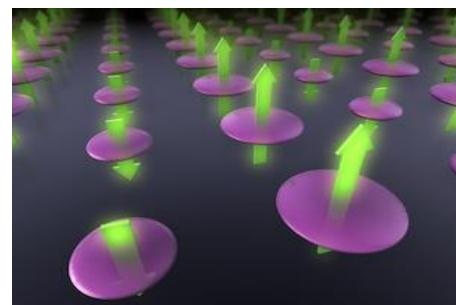
La aplicación de la espectroscopía Raman y FTIR en el análisis de materiales contenidos en tintas encontradas en cámaras funerarias egipcias ha sido otra de las tareas que se han desarrollado en nuestro grupo durante este año. Este tipo de estudio implica gran dificultad ya que ha de realizarse in-situ con instrumentación portátil capaz de ser introducida en la cámara funeraria. La espectroscopía Raman se ha empleado en el análisis de los pigmentos contenidos en esas tintas. Sin embargo, la presencia de un alto contenido de sustancias orgánicas en las mismas ha dificultado enormemente esta aplicación. Sin embargo, la técnica DRIFT ha permitido la caracterización in-situ de estas tintas, si bien las señales más intensas provienen en este caso de los materiales dispersantes y aglutinantes. No obstante, los espectros DRIFT han proporcionado una importante información sobre el contenido de materiales como calcita, yeso, cola animal, ceras, aceites. Estos materiales presentan diferentes señales en diferentes puntos que han permitido diferenciar la intervención de diferentes escribas en los paneles estudiados.

En el año 2022 se ha comenzado con el estudio por espectroscopía micro-Raman de muestras arqueológicas dentro de la Conexión Arqueología del CSIC. Se han analizado muestras de suelo y paredes pintadas de viviendas del yacimiento neolítico de Çatalhöyük, observándose señales correspondientes al ocre rojo, y la presencia de yeso, que no corresponde a los materiales empleados en las construcciones. Asimismo, se ha comenzado el estudio de pegamentos empleados en útiles prehistóricos de diversos yacimientos de oriente próximo. He han llevado a cabo estudios por espectroscopía micro-FTIR para poder llevar a cabo los análisis de forma no destructiva.

## PROPIEDADES ÓPTICAS DE METASUPERFICIES: ESTADOS LIGADOS EN EL CONTINUO

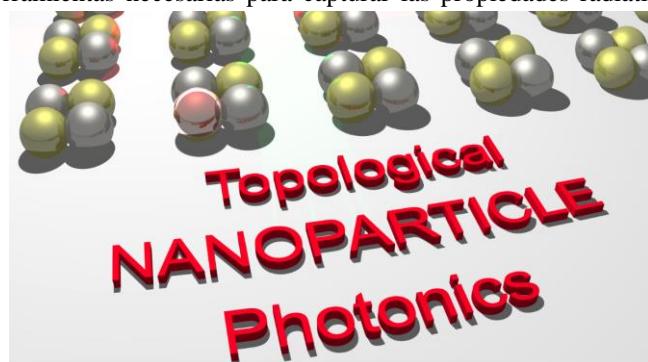
Hemos continuado nuestro trabajo sobre redes periódicas planas (metasuperficies) de estructuras resonantes dieléctricas y plasmónicas sub-longitud de onda con especial énfasis en estados ligados en el continuo (BICs en inglés). Los BICs han atraído mucho interés últimamente en Fotónica por su factor Q infinito (teóricamente). Estos estados son modos con perdidas que en un cierto límite de algún espacio de parámetros no pueden acoplarse a ningún canal de radiación. Para atrapar la luz en tales modos electromagnéticos de ancho de línea casi cero, es habitual explotar las propiedades ópticas de metasuperficies: los canales especulares salientes se pueden suprimir ajustando los parámetros del sistema de varias maneras, lo que conduce a BIC protegidos por simetría. En este sentido, sobre la base de una teoría generalizada de dipolos eléctricos/magnéticos acoplados para redes planas infinitas, se ha investigado una variedad de escenarios en los que meta-átomos simples o dobles se pueden describir mediante una combinación de varios dipolos eléctricos y/o magnéticos. Nuestro trabajo teórico se ha desarrollado en colaboración con el Donostia International Physics Center, apoyado por el proyecto MELODIA del MICIN. Además, hemos demostrado que:

- Las metasuperficies de dímero de nanodiscos de silicio con resonancias dipolares en redes que no son de Bravais pueden soportar BICs robustos protegidos por simetría en la longitud de onda de las telecomunicaciones, corroborado experimentalmente por los grupos de Sunshuke Murai (*Kyoto University*) y Jaime Gómez Rivas (*Surface Photonics, Technical University of Eindhoven*).
- Se pueden encontrar condiciones analíticas explícitas en el régimen dipolar que permiten predecir posiciones de BICs accidentales en el espacio de parámetros ( $\omega, k_{\parallel}$ ). Estas condiciones se aprovechan para determinar BICs accidentales no solo simples, sino también dobles (para ambas polarizaciones lineales) que ocurren en la misma posición en la relación de dispersión  $\omega - k_{\parallel}$  para meta-átomos de nanodiscos semiconductores realistas. En este sentido, hemos demostrado la conversión de polarización mediante el uso de metasuperficies totalmente dieléctricas en redes cuadradas y rectangulares de nanodiscos dieléctricos. El ajuste preciso de los parámetros de la red y de los discos permite transformar la luz polarizada linealmente en luz polarizada circularmente con tasas de conversión cercanas a la unidad, lo que produce luz polarizada circularmente a derechas e a izquierdas bajo demanda con solo variar el ángulo de incidencia.



## NANOFOTÓNICA TOPOLOGICA

La nanofotónica topológica es una nueva vía para explorar sistemas a la nanoescala desde frecuencias visibles hasta THz con un control sin precedentes. Al aceptar su complejidad y utilizar plenamente las propiedades que los distinguen de los sistemas electrónicos, nuestro objetivo es estudiar nuevos fenómenos topológicos. El año pasado nos enfocamos en el estado actual del campo y destacamos el uso de sistemas de nanopartículas para explorar fases topológicas más allá de los análogos electrónicos. Proporcionamos varios trabajos sobre las herramientas necesarias para capturar las propiedades radiativas, retardativas y de largo alcance de estos sistemas. Discutimos la aplicación de nanopartículas dieléctricas y metálicas en sistemas no lineales y también brindamos una descripción general del tema recientemente desarrollado de nanopartículas aislantes topológicas. Esperamos que una comprensión integral de los sistemas fotónicos de nanopartículas topológicas nos permita explotarlos en todo su potencial y explorar nuevos fenómenos topológicos en dimensiones muy reducidas.



## COMPORTAMIENTO FÍSICO A NANO-ESCALAS

Dentro de nuestras investigaciones sobre la adsorción de hidrógeno molecular a temperaturas criogénicas en 2022 hemos avanzado muy significativamente en el estudio experimental y análisis teórico del comportamiento metaestable en la adsorción de hidrógeno en determinadas nanoestructuras carbonosas. La aparición de metaestabilidad en la fisisorción de hidrógeno en materiales porosos, esto es, de histéresis en los ciclos de adsorción/desorción isoterma, no es un fenómeno habitual y en particular nunca se había observado en el caso de los materiales carbonosos. Los pocos casos reportados resultaron ser causados por algún tipo de quimisorción en las impurezas metálicas presentes en el material. Desde el punto de vista de su aplicación práctica para el almacenamiento y la gestión del hidrógeno la fisisorción es claramente preferible dada su baja barrera energética para liberar el hidrógeno. Por otro lado, la histéresis en sí, es muy interesante desde el punto de vista práctico dado que permitiría tanto unas presiones de trabajo menores para la misma carga (alta presión sólo durante la carga del combustible) como un mejor manejo de los flujos de calor en el sistema.

Hace ya un tiempo descubrimos un tipo de material nanoestructurado compuesto principalmente por haces de nanotubos de carbono de doble capa que presentaba no sólo una adsorción de hidrógeno significativa sino ciclos de histéresis pronunciados. Durante 2022 mediante el uso de diversas técnicas analíticas (principalmente dispersión de neutrones), modelado numérico y análisis teórico hemos avanzado mucho en el entendimiento de los mecanismos microscópicos involucrados en tan peculiar fenómeno. En particular, hemos podido descartar la quimisorción como origen de la metaestabilidad por lo que, hasta donde alcanza nuestro conocimiento, sería el primer caso conocido de histéresis en la fisisorción de hidrógeno en materiales carbonosos.

Dentro de la consolidada colaboración con el grupo de la Dra. Leonor Chico en la Universidad Complutense, hemos completado el estudio de la sorprendente estructura electrónica de nanotubos de carbono de capa simple en su estado colapsado. Con anterioridad habíamos demostrado que una clase de dichos sistemas representan un ejemplo particularmente útil de lo que se conoce como super redes de Moire unidimensionales presentando todas las características de su homólogo bidimensional, las celebradas bicapas de grafeno desalineadas (twisted bilayer graphene, TBG); sin embargo, quedaba por indagar la universalidad del comportamiento ya que los estudios se habían ceñido a un clase específica de nanotubos cuyos

parámetros geométrico facilitaban el cálculo de las propiedades electrónicas. Durante 2022 hemos podido calcular con éxito la estructura electrónica del resto de clases de nanotubos (dos clases más) y demostrar que el comportamiento electrónico anómalo característico de los TGBs es universal en los nanotubos colapsados.

#### R3B@GSI-FAIR: O. Tengblad, D. Fernández Ruiz, A. Perea (AEI PID2019-104390GB-I00).

La puesta en marcha del experimento R3B, del que O. Tengblad como director técnico de R3B es responsable, se inició en febrero de 2019. Esta puesta en marcha ha continuado durante los primeros días de cada uno de los períodos de tiempo de haz en 2020, 2021 y 2022, además se aprobó una nueva propuesta en 2022 para continuar esta importante actividad hasta el traslado del equipo a la Cueva de Alta Energía (HEC) en 2025-26.

Durante la campaña 2022 en R3B-FAIR se llevaron a cabo los siguientes experimentos:

- S522: Caracterización de correlaciones de corto alcance en núcleos exóticos (A.Corsi, O.Hen). El experimento es el primer estudio de correlación de corto alcance (SRC) con un núcleo radiactivo ( $^{16}\text{C}$ ) dispersado contra un blanco de protones en cinemática inversa. Los resultados iluminarán las propiedades de SRC en un núcleo asimétrico, aprovechando la exclusividad de la medición de coincidencia cuádruple con el nucleón de residuo y retroceso detectado después de la ruptura del par SRC. Dependiendo de los resultados, el método se puede aplicar en FAIR para estudiar SRC en núcleos aún más asimétricos. Los datos se tomaron durante el tiempo de haz de la Fase-0 del 16 al 24 de mayo.
- S509: Estudio de fenómenos en línea de goteo en núcleos ricos en neutrones: (O.Sorlin, M.Assié). El experimento explora nucleones profundamente ligados mediante reacción de knockout cuasi-libre (QFS) para promover  $2n$  y  $4n$  en el continuo. Estudio de las desintegraciones  $2n$  y  $4n$  (directas/secuenciales) en función de la energía de enlace del nucleón expulsado y estudiar la evolución de  $r_{nn}$  con la energía de enlace y la masa A. Los datos arrojarán luz sobre el papel del mecanismo de reacción en las reacciones QFS. Los datos se tomaron durante el tiempo de haz de la Fase-0 del 31 de mayo al 6 de junio.

A pesar de la inexistencia de sistemas de dos neutrones unidos, las interacciones de emparejamiento juegan un papel crucial en los núcleos atómicos y en la física cuántica de muchos cuerpos en general. En los núcleos el emparejamiento de dos neutrones y/o dos protones es responsable de la asombrosa variación par/impar observada en la energía de enlace y del hecho de que todos los núcleos pares tienen un estado fundamental  $J = 0^+$ . En términos más generales, las correlaciones de apareamiento implican un suavizado del nivel de ocupación alrededor de la superficie de energía de Fermi, una mejora de las probabilidades de transferencia de pares, así como un comportamiento superfluido en la rotación nuclear y la vibración.

En S509 se utilizan reacciones de knockout de protones profundamente unidas a energía de impacto de 600 MeV/u para investigar las correlaciones de dos neutrones en los núcleos  $^{20}\text{C}$ ,  $^{17}\text{B}$ ,  $^{14}\text{Be}$ ,  $^{14}\text{B}$  y  $^{11}\text{Li}$ . Estas mediciones deberían permitir estudiar la evolución de los estados lejos de la estabilidad y caracterizar la interacción de apareamiento de neutrones en función de la energía de enlace de neutrones, el tamaño nuclear y la ocupación de las capas. Este estudio también incluirá la búsqueda de estados resonantes estrechos, posiblemente configuraciones de di-neutrón, alrededor de los umbrales de emisión de dos neutrones correspondientes. Esta observación sería esencial para establecer si una conjectura generalizada de Ikeda, generalmente aplicada a  $\alpha$  cúmulos, puede generalizarse a sistemas de dos neutrones o incluso de cuatro neutrones, y si es así, bajo qué condiciones. En términos más generales, el experimento permitirá estudiar la espectroscopía de estados no ligados con una resolución de energía sin precedentes. El separador de fragmentos FRS se utilizó para producir y seleccionar los núcleos de interés, por ejemplo,  $^{21}\text{N}$ ,  $^{18}\text{C}$ ,  $^{15}\text{B}$  y  $^{12}\text{Be}$ , vea la figura:

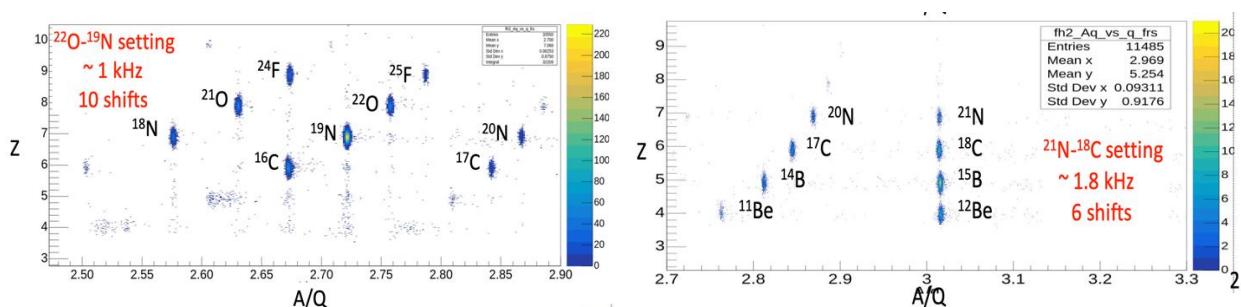


Fig. Z vs A/Q plot para la identificación de los núcleos producidos en el FRS, con los parámetros del Haz primario:  $40\text{Ar} @ 600 \text{ MeV/u}$

**WASA@FRS: DeepHyp - Técnicas de deep learning para el estudio de hipernúcleos exóticos (ref: 2019-T1/TIC-13194), C. Rappold, S. Escrig López.**

Dentro de la colaboración WASA@FRS, la campaña experimental WASA-FRS se llevó a cabo con éxito en el primer trimestre de 2022, con la finalización el experimento S447 de espectroscopía de hipernucleos y el experimento S490 de núcleos con eta-prime ligados en las instalaciones de GSI-FAIR, Alemania. En 2019, la parte central del detector WASA se transportó a GSI-FAIR. En el experimento S447, el sistema detector central WASA se combina con el separador de fragmentos (FRS) de GSI. Los fragmentos emitidos hacia adelante desde de la desintegración hipernuclear serán medidos por la segunda mitad del FRS (S2-S4) con una excelente resolución de momento. Las partículas ligeras procedentes de la desintegración de los hipernúcleos serán medidas por los detectores WASA. El proyecto DeepHyp se centró primero en la preparación del experimento experimento S447, y ahora en el análisis de los datos obtenidos. El desarrollo de nuevas técnicas de análisis basadas en técnicas de aprendizaje profundo tiene como finalidad de mejorar la espectroscopía hipernuclear. El objetivo principal es abordar el rompecabezas actual del tiempo de vida del hipertritón y la confirmación de la observación del estado ligados nn $\Lambda$ .

La preparación del experimento ha sido una parte muy importante del plan del proyecto DeepHyp de 2021 al principio de 2022. La puesta en marcha tuvo lugar en enero-febrero de 2022, y la toma de datos experimentales en marzo de 2022. Se llevó a cabo la finalización de las simulaciones Geant4 del aparato experimental realista. Se estimaron eficiencias más realistas de la trayectoria de partículas y de la reconstrucción de sucesos. La óptica iónica de S2-S4 se optimizó para una alta aceptación de fragmentos con un poder de resolución de 5200. Se están desarrollando nuevos algoritmos de aprendizaje profundo para el procedimiento de búsqueda de trayectorias mediante graph neural networks. Hemos iniciado la I+D de un nuevo detector de micro vértices de silicio para estimación precisa del vértice de interacción de las colisiones nucleares. El análisis de los datos está en curso y la primera tarea se centra en la calibración de los detectores de la configuración experimental completa, la identificación de partículas nos ha permitido observar piones, protones y fragmentos dentro del sistema de detección WASA y el especlómetro de alta resolución FRS S2-S4.

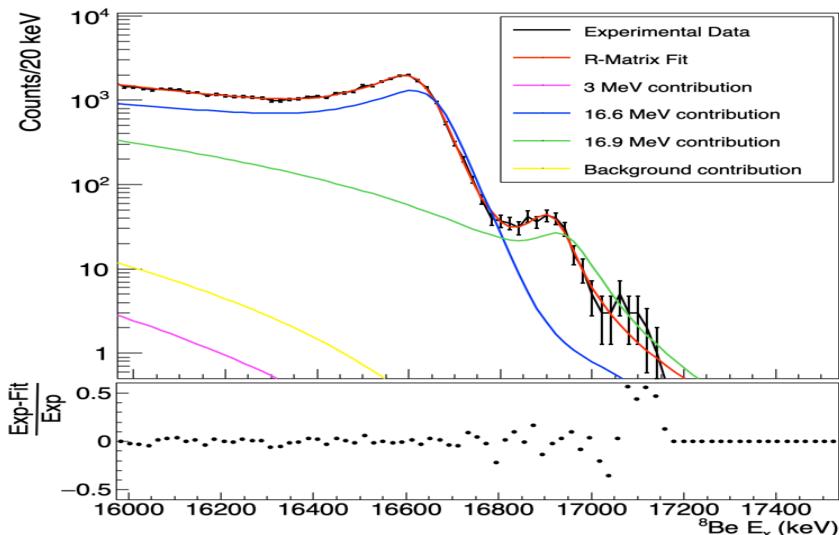
**Hyp@FRS - Métodos de aprendizaje automático aplicados a la espectroscopía de hipernucleos: el puzzle de la vida útil de hipertritio y de la existencia de nnLambda estudiados en WASA@FRS (ref: PID2020-118009GA-I00), C. Rappold, S. Escrig López.**

El objetivo de Hyp@FRS es estudiar con precisión los hipernúcleos ligeros con reacciones inducidas por iones empleando el separador de fragmentos de las instalaciones GSI y FAIR de Darmstadt (Alemania) como especlómetro de alta resolución. El objetivo de Hyp@FRS es la mejora de la espectroscopía mediante el aprendizaje automático. La actividad propuesta gira en torno al proyecto WASA@FRS que tiene lugar en las instalaciones GSI-FAIR. Con el éxito del experimento S447, el proyecto propuesto tiene como objetivo validar o descartar los descubrimientos que publicamos de nuestra primera campaña experimental HypHI - Fase 0. Se llevará a cabo el desarrollo de métodos innovadores en aprendizaje automático sobre los experimentos de espectroscopía hipernuclear. En primer lugar, se investigarán las redes neuronales convolucionales y las arquitecturas de memoria a corto plazo para el modelado no lineal de la óptica de iones en el especlómetro magnético y, en segundo lugar, en el seguimiento de las partículas medidas en el aparato experimental. La campaña del experimento WASA@FRS tuvo lugar durante el primer trimestre de 2022. El análisis de datos utilizará los métodos de aprendizaje automático explicados anteriormente. Además, en este proyecto se lleva a cabo la I+D para la lectura electrónica de los microdetectores de vértice de silicio y su construcción. El objetivo final del proyecto es resolver el rompecabezas actual de la vida del hipertritón y la confirmación de la observación del estado ligado nn $\Lambda$  (un estado de dos neutrones y un hiperón  $\Lambda$ ).

**IS633: Elucidación de la estructura del doblete 16.6 - 16.9 MeV de  ${}^8\text{Be}$  a través de desintegración  $\beta$ :**  
*D. Fernández Ruiz, M.J.G. Borge, (AEI PID2019-104390GB-I00).*

La desintegración  $\beta$  del núcleo con halo de protones  ${}^8\text{B}$ . es una buena sonda para explorar la estructura de  ${}^8\text{Be}$ , en particular el doblete de isospín  $2^+$  formado por dos niveles estrechos a 16.6 y 16.9 MeV, con configuraciones dominantes respectivamente de  ${}^7\text{Li} + \text{p}$  y  ${}^7\text{Be} + \text{n}$ , que no se ha estudiado previamente en la desintegración  $\beta$ . Este doblete es el mejor caso conocida para estudiar la mezcla de isospín predicho entre estados nucleares.

Los detalles de este experimento se pueden encontrar en nuestros informes anteriores (2020-21). La desintegración de  ${}^8\text{B}$  en el estado 16.626 (3) MeV se ha observado anteriormente, pero la desintegración (principalmente EC) al estado 16.922 (3) MeV, únicamente existía indicios apartir de solo 5 eventos, en un experimento nuestro en JYFL. En el experimento de IS633 tenemos muy buena estadística de la desintegración a este estado. Al ser un experimento de alta precisión, el análisis debe realizarse con gran cuidado, por lo tanto, todavía está en curso. Sin embargo, a partir del espectro  $\beta$  reconstruido ya podemos confirmar que la alimentación  $\beta$  al doblete de 16.6-16.9 MeV se resuelve por primera vez. Usando estos datos de alta estadística, la alimentación de los estados  $2^+$  en  ${}^8\text{Be}$  se estudió utilizando el formalismo R-Matrix. Esto ha permitido por primera vez verificar experimentalmente que los estados de 16.6 y 16.9 MeV de  ${}^8\text{Be}$  están completamente mezclados con isospin. Además, pudimos determinar a través de un estudio del espectro de retroceso  $\beta$  que la desintegración está dominada por su componente Gamow-Teller de hasta 15 MeV.



*Fig. Espectro de alimentación beta (negro) con el R-Matrix fit (rojo) y sus componentes individuales.*

Los resultados obtenidos hasta ahora, se presentaron en la XIV reunión CPAN ("Probing the structure of  $^8\text{Be}$  through the Beta decay of  $^8\text{B}$ : An R-Matrix analysis", D.F.Ruiz, Bilbao, 24-Nov-2022) y en el congreso EuNPC ("R-Matrix study of the beta decay of  $^8\text{B}$  to the highly excited states of  $^8\text{Be}$ ", D.F.Ruiz, Santiago de Compostela, 27/11/2022).

**IS659: Mediciones precisas de las desintegraciones de  $\beta$  de  $^9\text{Li}$  y  $^8\text{He}$  para experimentos de reactor neutrinos:** *M.J.G. Borge, O. Tengblad, A. Perea, V. García Távora* (AEI PID2019-104390GB-I00).

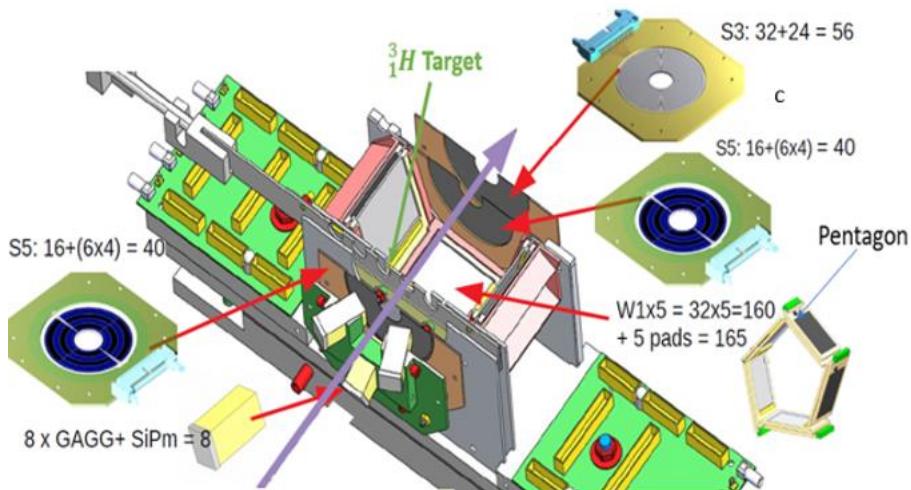
Las desintegraciones  $^9\text{Li}$  y  $^8\text{He}$  producidas por los rayos cósmicos representan una de las más grandes Fondos irreducibles para experimentos de antineutrinos de reactores. El tratamiento correcto de tales desintegraciones es, por lo tanto, de gran importancia en el desarrollo de métodos para reducir este fondo cosmogénico en los cálculos. Los datos existentes sobre los esquemas de desintegración de  $^9\text{Li}$  y  $^8\text{He}$  son insuficientes para un tratamiento adecuado de los experimentos de antineutrinos de reactores actuales y planificados. Este experimento de la colaboración MAGISOL en ISOLDE proporcionará los datos faltantes midiendo por primera vez las coincidencias entre neutrones y partículas cargadas, incluidas las partículas  $\beta$ . Un sistema muy compacto para la detección de partículas cargadas, en combinación con el IDS HPGe gamma y de INDIE neutron arrays fue diseñado por A. Perea y construido en IEM. El primer experimento, estudiando el caso de  $^8\text{He}$  fue montado y tomó haz radiactivo en el período del 25 de abril a 25 de mayo. Los datos están siendo analizados.

**IS690: Estudios de reacción con núcleos ligeros ricos en neutrones en el dispositivo SEC actualizado: Prueba de la inversión de paridad en  $^{11}\text{Li}$ :** *D. Fernández Ruiz, O. Tengblad, M.J.G. Borge, A. Perea* (AEI PID2019-104390GB-I00).

Se acuñó el término de un núcleo de halo para describir un grupo de núcleos con una extensión espacial inusualmente grande, divergiendo del estándar  $r=r_0A^{1/3}$ . La primera observación empírica de este comportamiento provino de experimentos de dispersión de isótopos de litio, destinados a medir la sección eficaz de interacción de núcleos ricos en neutrones. A medida que nos alejamos de la línea de estabilidad, la sección eficaz aumenta drásticamente, apuntando hacia un radio nuclear mayor que la predicción teórica. Este descubrimiento fue interpretado como un nuevo tipo de sistema nuclear, formado por un núcleo compacto más un halo externo. El isótopo  $^{11}\text{Li}$  es el arquetipo de un halo de dos neutrones: un sistema borromeo de tres cuerpos formado por dos neutrones correlacionados unidos a un núcleo de  $^9\text{Li}$ . Si bien se sabe que la estructura g.s de  $^{11}\text{Li}$  es una mezcla de ondas p (59 (1 %) + s (35 (4 %) + d (6 (4 %)), aún falta el conocimiento de niveles de energía más altos. El experimento, se llevará a cabo en las instalaciones de HIE-ISOLDE en 2023. Durante 2022 hemos trabajado en la simulación de montecarlo (Geant4) para optimizar la configuración de detección;

Identificar la influencia de las reacciones de fondo (especialmente el  $^9\text{Li}(p,d)^{10}\text{Li}$  y los canales elásticos, es crucial en estos experimentos, por lo tanto, necesitamos una configuración que pueda diferenciar entre productos de reacción muy similares y ofrecer una cobertura angular óptima. Nuestra configuración de detección mejorada en SEC (Cámara Experimental de Dispersión) consistirá en tres tipos de detectores: a) el detector SAND para la detección de neutrones, b) 8x centelleadores GAGG para la detección gamma, c) una serie de detectores de partículas cargadas. El experimento prevé un haz de  $^9\text{Li}$  acelerado hasta 7 MeV/u que incide a una lámina de titanio con  $^3\text{H}$  implantado. La configuración del detector de partículas cargadas está compuesta por las siguientes partes a) 5 telescopios de partículas formados por detectores de tiras de silicio de doble cara (DSSD) y un detector de silicio más grueso (PAD) que rodea el objetivo, formando un pentágono que cubre la

mayoría de las direcciones tangentes a la línea de luz. b) 2 detectores circulares de silicio (CD) (S3+S5) forman un telescopio que cubre la dirección hacia adelante. C) Un detector circular adicional (S5) cubre la dirección hacia atrás.



*Fig: Asamblea de detectores para partículas cargadas*

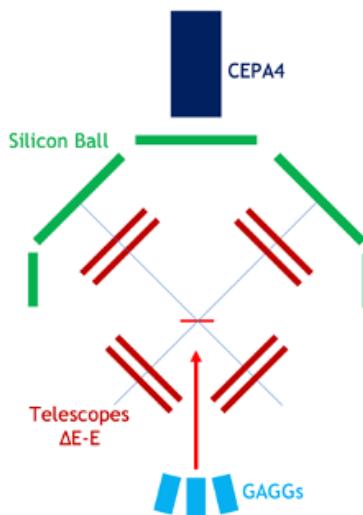
**IS698: HIE-ISOLDE SEC  $^{112}\text{Sn} + ^4\text{He}$ : dispersión a en isótopos de estaño inestables ricos en protones en cinemática inversa para el proceso-p astrofísico:** O. Tengblad, M.J.G. Borge, D. Fernández Ruiz, (AEI PID2019-104390GB-I00)

El escaso conocimiento del potencial  $\alpha$  nuclear en núcleos inestables sigue dominando las incertidumbres asociadas a la producción de los núcleos p pesados. Los cálculos de la sección eficaz de dispersión elástica a energías cercanas a la barrera de Coulomb basados en potenciales globales de  $\alpha$  núcleos difieren hasta un factor de 2 cuando se mueven hacia núcleos inestables con mayores proporciones de protones a neutrones. Este experimento estudia por primera vez distribuciones angulares completas del proceso de dispersión elástica  $\alpha$  en núcleos Sn exóticos a energías alrededor de la barrera de Coulomb, cerca de la región de energía de interés astrofísico, aprovechando los blancos  $^4\text{He}$  de estado sólido recientemente desarrollados (US Sevilla), los haces de estaño de alta intensidad disponibles en HIE-ISOLDE y una configuración de detector versátil en la cámara SEC. El experimento fue dirigido por el grupo del Dr. D. Galaviz de LIP Lisboa. El grupo IEM fue responsable de la configuración experimental y de la adquisición de datos utilizada durante el experimento en HIE-ISOLDE. El experimento fue preparado y obtuvo haz radiactivo en el período comprendido entre el 19 de agosto y el 29 de septiembre, se obtuvieron muy buenos datos que están bajo análisis.

**CMAM: Estudios de las reacciones nucleares de núcleos ligeros con intereses astrofísicos:  $\alpha$ -Clustering en núcleos ligeros:** V.G. Távora, D. Fernández, A.N. Nerio, A. Perea, M.J.G. Borge, O. Tengblad. (AEI PID2019-104390GB-I00).

- Poblando estados  $\alpha$  no ligados en  $^{16}\text{O}$  mediante la reacción  $^{19}\text{F}(\text{p}, \alpha\gamma)^{16}\text{O}$

La reacción  $^{12}\text{C}(\alpha, \gamma)^{16}\text{O}$  tiene una gran importancia para la Astrofísica Nuclear, debido a su relevancia tanto a la hora de determinar la proporción de carbono que se transforma en oxígeno, como en la nucleosíntesis de los elementos más allá de A=16. En los últimos 60 años, se han producido muchos avances en su estudio, sin embargo, la incertidumbre de la sección eficaz total sigue siendo demasiado elevada. Esta sección eficaz se determina mediante la suma de las colas de resonancia y capturas directas de los estados fundamental y excitados de  $^{16}\text{O}$ , ya que no existe un estado de paridad natural que sirva como resonancia para la captura radiativa directa de  $^{12}\text{C}(\alpha, \gamma)^{16}\text{O}$ . Por ello, utilizamos la reacción  $^{19}\text{F}(\text{p}, \alpha\gamma)^{16}\text{O}$  para poblar los estados excitados de  $^{16}\text{O}$  resonantes emisores de  $\alpha$  y determinar sus anchuras.



Para estudiar esta reacción utilizamos un haz de protones de energía de laboratorio 2.6 MeV que impacta sobre un blanco de  $\text{CaF}_2$  situado dentro de la cámara de vacío de la línea de Física Nuclear de CMAM.

El sistema de detección consta de 14 detectores de silicio pixelados en  $5 \times 5 \text{ cm}^2$  que cubren ángulos desde  $27^\circ$  hasta  $87^\circ$ , 4 telescopios ( $\Delta E - E$ ) de  $5 \times 5 \text{ cm}^2$  constituidos por un detector de silicio multi-segmentado DSSD ( $\Delta E$ ) y un PAD ( $E$ ), cada uno. Para la detección de radiación gamma contamos con 8 detectores GAGG y el detector CEPA4 (centelleador phoswich). Ver Fig. 1. Los datos obtenidos se encuentran en fase de análisis. En la figura 2 se muestran los estados excitados del  $^{16}\text{O}$  y los posibles estados involucrados en la reacción. En la Fig. 3 se muestra el espectro obtenido y los espectros resultantes de las distintas condiciones de coincidencia.

Fig. 1. Esquema del montaje experimental.

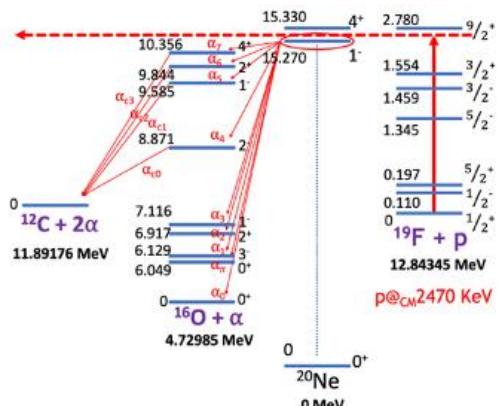


Fig. 2. Esquema de niveles de la reacción.

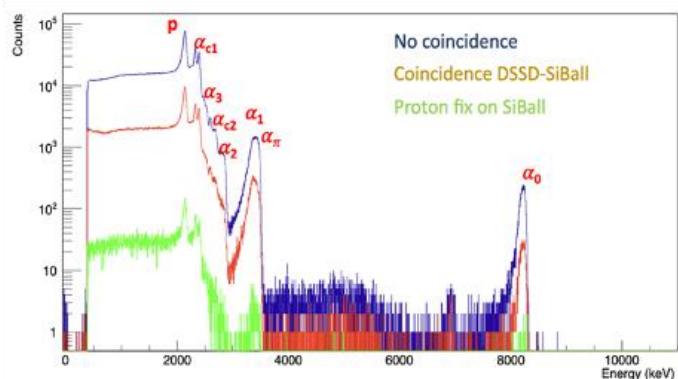


Fig. 3. Estudio de coincidencias e identificación  $\alpha$ .

Se ha llegado a realizar una identificación preliminar de los niveles de  $^{16}\text{O}$  origen de las partículas  $\alpha$  emitidas en la reacción, así como un estudio de los sucesos en coincidencia entre los diferentes detectores del montaje experimental. Los resultados preliminares que se han obtenido fueron presentados en la conferencia EUNPC (European Nuclear Physics Conference) en octubre.

- Estudio de la abundancia primordial de  $^9\text{Be}$  mediante la reacción  $^7\text{Li}(\text{t},\text{n})^9\text{Be}$ .

La situación con respecto a la abundancia del  $^7\text{Li}$  primigenio está lejos de ser clara, y es necesaria una comprobación de las predicciones de SM para las abundancias primigenias. Durante mucho tiempo, se había pensado que el  $^9\text{Be}$  se producía en cantidades cada vez más pequeñas en la nucleosíntesis del Big Bang. Sin embargo, cálculos recientes indican que la reacción  $^7\text{Li}(\text{t},\text{n})^9\text{Be}$  incrementa la abundancia del  $^9\text{Be}$  en varios órdenes de magnitud comparado con lo considerado previamente. Una forma de estimar la sección eficaz de  $^7\text{Li}(\text{t},\text{n})^9\text{Be}$  sería inferirla de los datos de reacciones similares, como  $^7\text{Li}(\text{He},\text{p})^9\text{Be}$ , ya que su sección eficaz puede medirse de forma más sencilla. Utilizando el mismo montaje experimental que para el caso de  $^{19}\text{F}(\text{p},\text{a})^{16}\text{O}$  se realizó un experimento para estudiar la reacción  $^7\text{Li}(\text{He},\text{p})^9\text{Be}$ . Además, este trabajo constituye un experimento complementario al experimento IS659 de ISOLDE (CERN) sobre la desintegración beta de  $^9\text{Li}$  y facilitará el análisis de dicha desintegración.

En estos dos experimentos se ha implementado un nuevo sistema de adquisición de datos que utiliza nuevos digitalizadores, lo que reduce en gran medida la electrónica asociada y simplifica la lógica de las señales, además permite realizar medidas con altas tasas de conteo (decenas de kHz) y bajo tiempo muerto. La introducción del nuevo DAQ requiere el desarrollo de un nuevo software de *unpacking* y análisis de datos. Los datos obtenidos en este experimento se encuentran en fase de análisis. Los telescopios de Si permiten realizar la identificación de las partículas emitidas en los dos canales posibles de reacción:  $^7\text{Li}(\text{He}, \text{p})^9\text{Be}$  y  $^7\text{Li}(\text{He}, \text{d})^8\text{Be} \rightarrow 2\alpha$ .

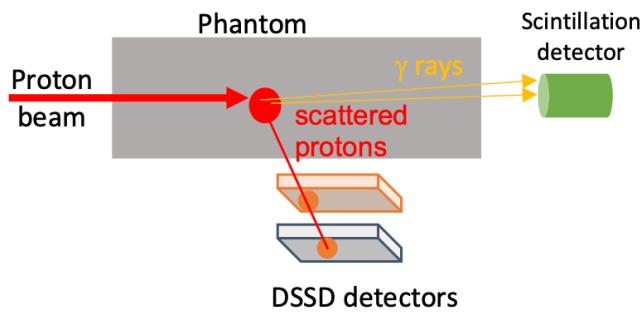
**PRONTO-CM: J.A. Briz, M.J.G. Borge, O. Tengblad, V. García, A. Perea, Amanda Nerio (B2017/BMD-3888 Comunidad de Madrid).**

Como hemos comentado en la memoria anterior (2021), la llegada de la técnica de proton-terapia a España en 2020 (Quirónsalud y Clínica Universitaria de Navarra) y los nuevos centros aprobados motiva nuevas actividades de investigación. El objetivo de nuestras actividades es diseñar un prototipo de escáner de protones utilizando la técnica de Tomografía Computarizada de protones (protón CT). El uso de esta técnica permitiría aumentar la precisión de los planes de tratamiento de terapia de protones y un mejor control de las dosis aplicadas al reducir las incertidumbres en el rango de protones con respecto a las imágenes obtenidas mediante TC convencional con rayos X.

En junio y diciembre de 2022, hemos continuado nuestros experimentos en el Cyclotron Centre Bronowice (CCB) en Cracovia (Polonia). Hemos utilizado un sistema de adquisición de datos actualizado para administrar tasas de conteo mucho más altas (40 kHz con < 5% de tiempo muerto). Como antes, se utilizaron radiografías de varias muestras con patrones espaciales construidos en aluminio insertados en una matriz de metacrilato de polimetilo (PMMA). Además, en este experimento se evaluaron aspectos relevantes como la determinación de los poderes de frenado relativos (RSP) de diferentes materiales y la influencia de la dispersión múltiple de Coulomb en las imágenes reconstruidas en un paso más hacia una implementación final a nivel clínico.

Un plan de tratamiento de terapia de protones exacto y preciso para tener éxito requiere una verificación de que la dosis recibida corresponde a la calculada en el plan de tratamiento. Para ello, se están estudiando varias técnicas que utilizan métodos directos o indirectos. Exploramos aquí algunos métodos indirectos utilizando rayos gamma rápidos, protones dispersos y neutrones secundarios.

- Rayos gamma rápidos: basado en la idea de medir los rayos gamma rápidos secundarios utilizando un detector de centelleo colocado Protón aguas abajo del fantasma. Para un rango más largo de protones se obtendría una mayor tasa de conteo de rayos gamma en los detectores de haz.
- Protones dispersos: utilizando nuestros detectores de seguimiento para determinar la distribución longitudinal de protones dispersos y correlacionarla con la posición del pico de Bragg.
- Neutrones secundarios: utilizando un convertidor neutrón-protón y los detectores de seguimiento para determinar la distribución longitudinal de los neutrones producidos por el paso de los protones en El fantasma.



*Fig. Configuración para las mediciones de verificación del rango de protones. El haz de protones sería idealmente un haz de lápiz que llega desde el lado derecho. Mediante el uso de los 2 detectores DSSD se puede deducir el punto de origen donde se dispersó el protón, o el neutrón se produjo si se coloca un convertidor n-p entre la fantoma y los detectores DSSD. El detector LaBr<sub>3</sub> colocado se utilizará para deducir los rangos de protones utilizando los rayos gamma secundarios producidos.*

**Estudio de estados monopartícula en núcleos de la capa fp mediante la reacción de transferencia  $^{50}\text{Ca}(\text{d}, \text{p})^{51}\text{Ca}$  @RIBF-RIKEN (PID2020-118265GB-C41), Carlos Ferrera; Andrea Jungclaus.**

Motivados por el descubrimiento y la posterior discusión en los últimos años sobre nuevos cierres de capa en núcleos ricos en neutrones con número de neutrones N = 32 y 34, que son fundamentales para explorar la evolución de los orbitales de la capa fp lejos del valle de estabilidad, en diciembre de 2022 se realizó el experimento SHARAQ12 (spokespersons K. Wimmer y D. Suzuki) en el centro de investigación RIKEN (Japón) con el objetivo de estudiar la estructura de monopartícula del  $^{51}\text{Ca}$  a través de la reacción de transferencia (d, p) utilizando un haz secundario degradado en energía de  $^{50}\text{Ca}$ . El haz se produjo en el separador BigRIPS y posteriormente se condujo a la línea OEDO, donde se degradó en energía a 15 MeV/nucleón con el propósito de inducir reacciones de transferencia (d,p) en un blanco de CD<sub>2</sub>, la identificación de partículas del haz basada en el método ToF-Bp mostró una excelente separación de isótopos. Los protones de retroceso dispersados en la reacción se midieron con el detector TINA2, que consiste en una caja de cuatro detectores de tiras de silicio de doble cara TTT respaldados por cristales de CsI, y una matriz de detectores de tiras de silicio tipo YY1 anulares con cristales CsI detrás. Los eyectiles pesados de  $^{51}\text{Ca}$  se midieron con el espectrómetro QGD equipado con un conjunto de detectores PPAC "Strip-Readout" y una cámara de ionización para la supresión de fondo a través de la identificación de carga. Las simulaciones preliminares de Geant4 previas al experimento y la participación en la preparación y ejecución de este experimento se convirtieron en parte del proyecto de tesis doctoral de Carlos Ferrera, el análisis de las energías de excitación y las distribuciones angulares está en curso.

**Espectroscopía gamma de alta resolución del  $^{136}\text{Te}$  dentro del proyecto HiCARI @RIBF-RIKEN (PID2020-118265GB-C41), estudiante de doctorado, Jaime Acosta; Andrea Jungclaus.**

Un primer experimento de espectroscopía gamma in-flight fue llevado a cabo en RIBF-RIKEN (Japón) para estudiar la excitación coulombiana de un haz de  $^{136}\text{Te}$  sobre un blanco de oro a energías relativistas, ve las memorias 2020-21. Además de la línea característica a 607 keV correspondiente al decaimiento del primer estado excitado  $2^+$  del  $^{136}\text{Te}$ , se observó por primera vez un exceso de intensidad de señal alrededor de 4 MeV, lo cual sugiere la existencia de un estado de excitón colectiva a unos 4 MeV. Por desgracia, la mala resolución en energías en este experimento hizo imposible determinar con precisión la energía y el modo de desintegración de este nuevo estado.

En otoño de 2020 se realizó un nuevo experimento en RIBF (NP1912-RIBF193) como continuación al de 2015, esta vez usando como espeítrómetro gamma una matriz de detectores de alta resolución de germanio (HiCARI) que permitirán determinar las propiedades del nuevo estado a alta energía del  $^{136}\text{Te}$ . Además de medir la excitación inelástica del  $^{136}\text{Te}$  con un blanco de oro, se utilizó un blanco adicional más ligero de berilio. Comparando las secciones eficaces de reacción medidas en ambos blancos se puede obtener información sobre el spin del nuevo estado.

En 2021 comenzó el análisis de estos datos como parte de los estudios de doctorado de Jaime Acosta. Aunque el análisis sigue en progreso, se han llevado a cabo ya algunos avances notables, como la producción de gráficas de identificación de partículas “limpias”, la calibración de los distintos detectores, el ajuste de simulaciones Montecarlo realistas e incluso la obtención de algunos espectros gamma con corrección Doppler preliminares, ve la figura. El siguiente paso será refinar el análisis de los datos para poder encontrar y estudiar con detalle el nuevo estado excitado del  $^{136}\text{Te}$ , y comparar los resultados con aquellos obtenidos con la simulación.

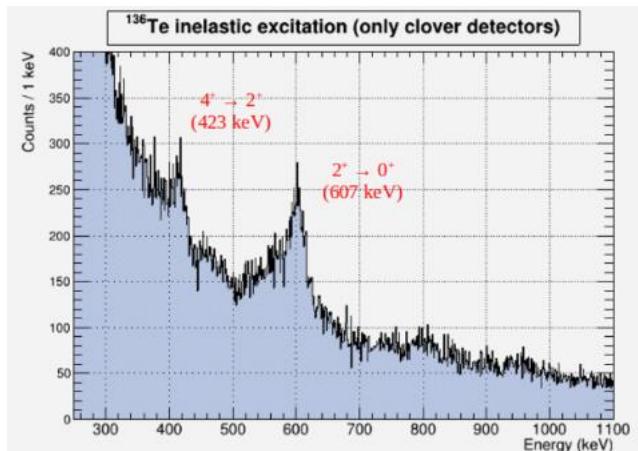


Fig. Espectro gamma de  $^{136}\text{Te}$  corregido por efecto Doppler

## 2A.3. DEPARTAMENTO DE FÍSICA MOLECULAR

### LÍNEAS DE INVESTIGACIÓN:

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

### SUBLÍNEAS DE INVESTIGACIÓN:

- Hielos astrofísicos.
- Caracterización espectroscópica de plasmas fríos de interés astrofísico.
- Generación, procesado y modelado de análogos de polvo interestelar.
- Espectroscopía Raman en chorros supersónicos de gases.
- Transferencia de energía por colisiones moleculares inelásticas.
- Parámetros espectroscópicos de moléculas relevantes en procesos colisionales, atmosféricos o de combustión.
- Modelización atomística y caracterización experimental de fases minerales, arcillas, silicatos, oxalatos, hielos de interés astrofísico y estudio de aditivos alimentarios.
- Control cuántico de alineamiento y orientación en moléculas aisladas y gases dipolares ultrafríos.

### TÉCNICAS UTILIZADAS:

- Espectroscopía de infrarrojo y espectrometría de masas aplicadas a sistemas de baja temperatura y baja presión.
- Métodos Computacionales: Gaussian, SIESTA, CASTEP, CRYSTAL, CP2K, Suite Materials Studio.
- Generación de plasmas fríos con descargas de radiofrecuencia a baja presión.
- Espectrometría de masas de neutros y iones. Sondas de Langmuir.
- Espectroscopía de emisión en el visible y UV próximo. Polarimetría.
- Sondas de Langmuir para medidas de energía electrónica y de densidad de carga eléctrica.
- Espectroscopía Raman lineal y no lineal (estimulada).
- Chorros supersónicos de gases.
- Espectroscopía de Doble resonancia Raman-Raman.
- Espectroscopía Infrarroja por Diferencia de Frecuencias.

### LABOR INVESTIGADORA:

#### FLUIDODINÁMICA MOLECULAR

Tras las mejoras instrumentales del año anterior, durante 2022 hemos continuado con el estudio de flujos de CO<sub>2</sub> fuera del equilibrio, y hemos iniciado una línea de investigación en microfluídica y otra de caracterización espectroscópica de contaminantes atmosféricos, en el marco de los proyectos en curso. Todos estos estudios se basan en experimentos en chorros sub- y supersónicos de gases, examinados mediante espectroscopía Raman cuantitativa. Los chorros supersónicos de gases son un medio extraordinariamente fértil en dinámica de fluidos, donde es posible estudiar las colisiones intermoleculares inelásticas, el mecanismo fundamental de transferencia de energía en gases. Para ello en el laboratorio de Fluidodinámica Molecular disponemos de dos instalaciones de diagnóstico de chorros de gases y líquidos mediante espectroscopía Raman, únicas en su género por sus prestaciones y flexibilidad, desarrolladas a lo largo de los últimos veinticinco años.

La relajación vibracional de CO<sub>2</sub> es un proceso de gran importancia en el balance radiativo de la atmósfera terrestre, así como de la de Venus y Marte, donde el gas suele estar fuera del equilibrio termodinámico. A pesar de ello, faltan datos experimentales de muchos procesos importantes de relajación interna. Hemos realizado nuevos experimentos de expansión de CO<sub>2</sub> a 200 y 500 C diluido al 10% en Ar, así como de CO<sub>2</sub> estático a 100 C para intentar determinar con más precisión las intensidades intrínsecas (momentos de transición de la polarizabilidad) de las bandas vibracionales Raman. Las intensidades Raman permiten cuantificar la densidad total de moléculas y las poblaciones de los niveles de energía rotacionales y vibracionales, que se pueden transformar a las correspondientes temperaturas T<sub>ROT</sub> y T<sub>VIB</sub>, mostrando la rotura del equilibrio termodinámico. De su evolución temporal a lo largo del chorro, hemos podido determinar numerosas magnitudes del flujo, como tiempos de relajación, incremento de entropía, capacidad calorífica de no-equilibrio, viscosidad de volumen, y tasas de

transferencia entre niveles internos por colisiones inelásticas. El análisis global de los experimentos de los últimos años nos ha permitido obtener un conjunto de tasas de transferencia rotacionales autoconsistente en el rango térmico de 50 a 600 K.

En la nueva línea de microfluídica, hemos realizado experimentos para probar el potencial de la espectroscopía Raman en el diagnóstico de flujos de gases en minicanales. Para ello se diseñó y construyó mediante impresión 3D una célula con un canal interno milimétrico, por la que se hicieron fluir caudales controlados de N<sub>2</sub> y CO<sub>2</sub>. A pesar de las limitaciones espaciales, conseguimos registrar espectros Raman rotacionales y vibracionales de esos gases, incluso en condiciones de flujo cuasi-enrarecido, y medir el pequeño gradiente térmico a lo largo del canal. Este trabajo es una colaboración con el grupo del profesor S. Colin de la Universidad Paul Sabatier de Toulouse (Francia).

Por último, hemos registrado espectros Raman de acetona CH<sub>3</sub>COCH<sub>3</sub>, CD<sub>3</sub>COCD<sub>3</sub> y diacetilo CH<sub>3</sub>COCOH<sub>3</sub>, tanto en condiciones estáticas como en expansión diluidos en gases nobles. Estas moléculas están implicadas en los ciclos de degradación atmosférica de varios compuestos orgánicos volátiles (VOC, por sus siglas en inglés). Se espera que el análisis de los espectros obtenidos permita una mejor caracterización de la dinámica intramolecular, y la detección remota de esas especies. Este trabajo se realiza en colaboración con el departamento de Química y Física Teóricas del IEM (M. L. Senent) y con la Universidad Mohamed V de Rabat (Marruecos), en el marco del proyecto europeo ATMOS.

## FÍSICA MOLECULAR DE SISTEMAS ASTROFÍSICOS Y PLASMAS

### Hielos astrofísicos.

Motivado por la reciente detección de urea en el medio interestelar, se ha publicado un estudio de la estabilidad de esta especie frente a radiación de ultravioleta VUV (6.3-10.9 eV) y frente a Rayos Cósmicos (simulando su efecto mediante bombardeo con electrones de 5 keV) a 30 K, 100 K y 140 K. Se han procesado tanto hielos puros como mezclas urea/agua, y se ha encontrado que la molécula de urea es relativamente estable comparada con otras especies como glicina, tanto vía fotólisis como radiólisis, siendo algo más eficiente su destrucción por radiólisis. Se observa un aumento de la estabilidad cuando aumenta la temperatura, lo que indica la presencia de algún mecanismo de reparación que se hace más eficaz cuando aumenta su movilidad en el sólido.

Se ha obtenido la distribución de energías de interacción del acetaldehído sobre la superficie de hielo de agua amorfa, tanto de forma experimental como teórica. Los experimentos fueron realizados en la cámara de ultra alto vacío disponible en el laboratorio de hielos del IEM, y los cálculos teóricos en la U. Stuttgart. El acetaldehído es una especie que se ha encontrado en nubes densas del medio interestelar en fase gas y la información proporcionada, publicada en la revista *Astronomy&Astrophysics*, es necesaria para el modelado de la química en estos entornos.

Se ha estudiado la difusión y sublimación de metano a través de capas de hielo de agua y polvo, para simular la actividad en núcleos de cometas en su órbita alrededor del Sol. Los procesos de sublimación aportan información de la morfología del interior del núcleo. Se estudiaron mezclas de 1% de metano en agua, con distintas morfologías y se realizaron ciclos de calentamiento-enfriamiento a distintas velocidades. Para simular el polvo se creció una capa de indeno, especie cuya temperatura de sublimación es superior a la del agua. El estudio constituyó el trabajo de fin de Master de Carla Tamai, que fue defendido en la TU Delf (Holanda).

La molécula de indeno (C<sub>9</sub>H<sub>8</sub>) se ha detectado en el medio interestelar en nubes densas a temperaturas de 10 K. Para su detección en fase sólida en los granos presentes en dichas nubes es necesario conocer su espectro IR a baja temperatura. Se han generado hielos de indeno e indeno/agua a 10 K y 160 K, y se ha registrado su espectro infrarrojo. También se ha estudiado su estabilidad frente a radiación VUV y Rayos Cósmicos.

### Generación, caracterización y procesado de análogos de polvo interestelar.

Se ha continuado la colaboración con el ICMM-CSIC usando la instalación Stardust para el estudio de nanopartículas generadas en condiciones análogas a las atmósferas de estrellas evolucionadas. En este caso se han usado simultáneamente dos magnetrones con blancos de Si y de C en atmósferas con diferentes concentraciones de H<sub>2</sub>. Las medidas de espectroscopía óptica de emisión que hemos realizado, han sido claves para entender los procesos de formación de moléculas que tienen lugar en las proximidades de la descarga. Actualmente se están analizando estos datos, junto con los obtenidos por técnicas de superficie en los depósitos obtenidos, y se avanza en los modelos de interpretación de resultados.

Como parte del proyecto i-Link (ver apartado de proyectos más abajo), hemos establecido una colaboración con el grupo del Dr. Ionut Topala, del Iasi Plasma Advanced Research Center (IPARC), Rumanía, para estudiar depósitos carbonáceos generados con diferentes clases de plasmas en nuestros respectivos laboratorios y los efectos de su posterior procesado mediante iones de alta energía (1 MeV) en un acelerador de tipo tandem en Bucarest, así como por electrones de 5 keV en el Laboratorio de Hielos de nuestro departamento. El estudio está en fase de análisis de resultados y se pretende ampliarlo con nuevos experimentos.

Se ha concluido el estudio experimental y teórico de evolución temporal de especies neutras y cargadas tras el inicio del plasma en descargas RF moduladas de C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>+Ar, en condiciones previas a la formación de nanopartículas carbonadas. Este trabajo se ha publicado en la revista *Plasma Sources Sci. Technol.*

En colaboración con el IAA-CSIC, se están llevando a cabo experimentos sobre la polarización de la luz dispersada de muestras de análogos de polvo carbonáceo interestelar generadas en nuestros reactores, a fin de comparar los resultados con lo encontrado en ciertas regiones del espacio.

Se ha escrito un artículo de revisión sobre los avances en el conocimiento de la estructura y evolución del polvo carbonáceo interestelar, destacando la importancia del trabajo de laboratorio como complemento imprescindible de las observaciones astronómicas.

#### **Dinámica de reacciones químicas elementales.**

En colaboración con el Departamento de Química Física de la Universidad Complutense (Unidad asociada CSIC), se han continuado los estudios teóricos sobre la reactividad del sistema F+HD a muy bajas energías de colisión (< 1 meV), en la zona de las resonancias orbitales.

#### **Modelización atomística y caracterización experimental de fases minerales, arcillas, silicatos, oxalatos, hielos de interés astrofísico y estudio de aditivos alimentarios.**

En la modelización computacional se han caracterizado de forma teórica las estructuras y espectros infrarrojos del hielo de urea como así mismo en el cálculo de las propiedades elásticas de materiales metal orgánicos en concretos del imidazol de zinc ZIF-75 el cual sorprendente e inesperadamente mostró compresibilidad lineal negativa y cuyos resultados se publicaron en *Applied Science*.

También se comenzaron a estudiar de forma teórica las estructuras de sales como el glutamato monosódico y un azúcar como el xilitol. Trabajos cuyos resultados preliminares se presentaron en la Reunión Nacional de Espectroscopía durante el mes de Julio en Málaga.

#### **Espectroscopía infrarroja de iones moleculares de interés astrofísico.**

Se ha finalizado la implementación de un campo magnético en el reactor de cátodo hueco donde se generan los iones moleculares en descargas eléctricas. El campo magnético, de geometría longitudinal, se crea mediante bobinas solenoides dispuestas coaxialmente con el reactor. Los resultados preliminares indican una sensibilidad similar a la obtenida con la técnica de modulación de corriente, pero con mejor selectividad para diferenciar las señales de iones de las de otras especies neutras presentes. En colaboración con los doctores O. Asvany, D. Gupta y W. Silva, se han registrado espectros de vibración-rotación y rotación pura de varios isotopólogos e isómeros de C<sub>3</sub>H<sub>3</sub><sup>+</sup>, empleando la novedosa técnica de “Leak Out Spectroscopy” en trampas iónicas. En colaboración con el Dr. S. Thorwirth y M. Bast, también de la Universidad de Colonia, se han registrado espectros de vibración de CH<sub>3</sub>CO<sup>+</sup> y CH<sub>3</sub>CS<sup>+</sup> empleando la infraestructura FELIX (Free Electrons Laser for Infrared Experiments) en Nimega.

### **ESPECTROSCOPÍA LÁSER**

#### **Parámetros espectroscópicos de moléculas relevantes en procesos colisionales, atmosféricos o de combustión.**

La actividad desarrollada en el Laboratorio de Espectroscopía Láser durante el año 2022 se enmarca dentro de la línea de investigación ya iniciada en el año 2020 y que tiene como hilo conductor el estudio de los ensanchamientos por presión de las líneas espectrales en sistemas colisionales en los que se encuentra presente la molécula de monóxido de carbono, CO, bien sea como molécula activa principal bien sea como colisionante. A lo largo de 2022 se han realizado medidas en tres sistemas colisionales:

- N<sub>2</sub>-CO (espectro rovibracional).
- CO-H<sub>2</sub> (espectro de rotación pura).
- CO-H<sub>2</sub> (espectro rovibracional).

En esta nomenclatura la primera molécula del par es la especie “activa”, cuyo espectro se registra para estudiar las variaciones en las formas y anchuras de las líneas espectrales, y la segunda molécula es la especie colisionante. En el primero de los casos arriba citados la especie activa es el nitrógeno molecular N<sub>2</sub> y la especie colisionante el CO, mientras que en los otros dos es la molécula de CO la que tiene el rol de especie activa y el hidrógeno H<sub>2</sub> la especie colisionante. El sistema colisional N<sub>2</sub>-CO tiene relevancia en sistemas de combustión (llamas, quemadores, cohetes...), mientras que el sistema CO-H<sub>2</sub>, ya se estude mediante espectroscopía rotacional o vibracional, tiene interés debido a su abundante presencia en medios astrofísicos como

las nubes interestelares. En todos los casos la técnica empleada para el estudio en el laboratorio de estas formas de línea ha sido la Espectroscopía Raman Estimulada, cuya principal característica es la altísima resolución que es capaz de proporcionar.

El grueso de las medidas en el sistema N<sub>2</sub>-CO ya se había realizado a lo largo del año 2021. Durante 2022 nuestro colaborador el profesor F. Thibault (Universidad de Rennes) ha llevado a cabo cálculos cuánticos (basados en el método close coupling CC) y semiempíricos (basados en las aproximaciones “infinite order sudden” (IOS) y “energy-corrected sudden” (ECS)). También se ha procedido a la repetición de algunas de las medidas en las que se observaban discrepancias experimento/cálculo. Tras esta repetición se ha elaborado un manuscrito, describiendo los resultados experimentales y teóricos, que se ha enviado ya al Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer. Cabe destacar que esta es la primera medida experimental de ensanchamientos existente para el sistema colisional N<sub>2</sub>-CO.

El segundo sistema sobre el que se han realizado medidas es el par CO-H<sub>2</sub> con objeto de estudiar el efecto de las colisiones en la forma y anchura de las líneas del espectro de **rotación pura** del CO. Este objetivo ha constituido un reto experimental en sí mismo dada la dificultad de la aplicación de la técnica SRS a espectros de frecuencias tan bajas como las de la rotación pura de la molécula de CO, hasta el extremo de que tras una primera demostración hace varias décadas por parte de los creadores de la técnica SRS nunca se ha vuelto a realizar este tipo de medida. Por ello, en una primera etapa se han introducido importantes modificaciones en nuestro experimento SRS que han incluido tanto las fuentes láser utilizadas como el esquema de mezcla de las mismas para excitar conjuntamente la muestra y finalmente su separación y filtrado. Esta expansión de nuestras capacidades experimentales, que ha requerido varios meses de trabajo, constituye un hito considerable por sí misma y nos ha dotado de la capacidad de registrar espectros Raman a frecuencias tan bajas como ~11 cm<sup>-1</sup> con resoluciones de 0.002 cm<sup>-1</sup>. Una vez conseguido este objetivo, se ha aplicado la técnica experimental al estudio de los ensanchamientos en el espectro Raman de rotación pura (Rama S, ΔJ=+2, entre J=0 y J=20) del CO perturbado por H<sub>2</sub> arriba mencionado mediante la correspondiente preparación de mezclas y la realización de medidas sistemáticas a múltiples presiones y tres temperaturas (77, 180 y 298 K). Como resultado principal se han obtenido conjuntos de coeficientes de ensanchamiento para las líneas rotacionales del espectro Raman del CO perturbado por colisiones con H<sub>2</sub>, así como exponentes que modelizan su dependencia con la temperatura. Dada la relevancia del incremento de nuestras capacidades experimentales en el marco de la espectroscopía Raman de alta resolución, se ha elaborado un manuscrito en el que se describe esta expansión experimental y los resultados iniciales obtenidos y se ha enviado para su publicación en el Journal of Raman Spectroscopy.

El tercer sistema sobre el que se han realizado medidas es nuevamente el par CO-H<sub>2</sub>, pero en este caso para estudiar el efecto de las colisiones en la forma y anchura de las líneas en su espectro **rovibracional**. Es importante destacar que el estudio de este sistema en rotación-vibración presenta un interés especial precisamente por la posibilidad que nos ofrece de realizar una comparación con el estudio en rotación pura que hemos llevado a cabo en este mismo sistema colisional: mientras que los ensanchamientos medidos en una rama Q rovibracional dan cuenta únicamente del efecto de las colisiones inelásticas (coeficientes de ensanchamiento isotrópicos) los ensanchamientos en líneas de rotación pura incluyen además el efecto de las colisiones elásticas sin cambio de estado (coeficientes anisotrópicos). La comparación de ambos tipos de resultados permitirá por tanto evaluar el “peso” relativo de las colisiones elásticas frente a las inelásticas en el sistema colisional constituido por las moléculas de CO y H<sub>2</sub>. Para ello se han preparado nuevamente mezclas de CO-H<sub>2</sub> y se han realizado medidas sistemáticas en el espectro Raman, en concreto la rama Q de la vibración fundamental (v=0 → v=1, ΔJ=0), para las líneas entre J=0 y J=20 a varias presiones diferentes (al menos cinco) y tres temperaturas (77, 195 y 298 K) mediante el uso de refrigerantes. Las medidas se han concluido con éxito y el análisis de los espectros ha permitido obtener un conjunto de coeficientes de ensanchamiento para las líneas rovibratoriales de esta rama Q, así como los exponentes que ajustan su dependencia con la temperatura. De cara al análisis comparativo de estos resultados, tanto con los de rotación pura como con los obtenidos mediante simulación para ambos tipos de espectro, el profesor Thibault ha iniciado ya cálculos cuánticos (CC) en estos mismos sistemas. Dado que el trabajo experimental está esencialmente completado y se está únicamente a la espera de los resultados de los cálculos, se espera que estos estén concluidos y un trabajo conjunto pueda publicarse a lo largo del primer semestre de 2023.

## 2A.4. DEPARTAMENTO DE FÍSICA MACROMOLECULAR

### LÍNEAS DE INVESTIGACIÓN:

- Simulación multiescala de materiales poliméricos y macromoléculas biológicas.
- Propiedades físicas y nanoestructura de polímeros, mezclas y nanocomuestos de matriz polimérica.
- 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:

- Nanocomuestos poliméricos: Estructura y propiedades físicas.
- Confinamiento en la estructura y la dinámica de la materia condensada blanda.
- Desarrollo de la estructura y propiedades de polímeros naturales y nanocomuestos.
- Dinámica molecular y propiedades dieléctricas.
- Interrelación estructura-dinámica en materia condensada blanda polimérica.
- Nano y microestructuración de superficies poliméricas.
- Electrónica orgánica.
- Estudio de los procesos de microdeformación, relación con la nanoestructura y optimización de propiedades mecánicas.
- 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.
- Sistemas poliméricos reciclables: morfología, estructura y propiedades.
- Dinámica molecular y propiedades viscoelásticas.
- Procesos de extrusión y elongación en poliolefinas y mezclas.
- Microscopía electrónica de transmisión: estructura y morfología de polímeros sintéticos y biológicos.
- Hidrodinámica de proteínas y complejos macromoleculares biológicos.
- Superficies virucidas.

### 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 electrónica de barrido (SEM).
- Microscopía electrónica de transmisión (TEM).
- Microscopía de fuerzas atómicas (AFM).
- Espectroscopía Raman.
- Dispersión de neutrones.
- Espectroscopía dieléctrica de banda ancha.
- Reometría de cizalla en torsión dinámica y continua, de extrusión capilar y elongacional.
- Microrreología.
- Análisis mecano-dinámico en tracción, flexión y compresión: módulo elástico.
- Cromatografía de permeabilidad en gel (GPC) con tetradetección.
- Dispersión estática y dinámica de luz láser (SLS y DLS).
- Simulaciones mediante uso de computación de alto rendimiento.
- Litografía de nanoimpresión (NIL).
- Espectroscopía de correlación de rayos X (XPCS).
- Micro-espectroscopía de rayos X en transmisión con barrido (STXM).
- Espectroscopía de absorción de rayos X (NEXAFS).
- Dispersión resonante de rayos X blandos (RSoXS).
- Impresión a chorro de polímeros.

## LABOR INVESTIGADORA:

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

#### RELACIÓN ENTRE ESTRUCTURA Y PROPIEDADES DE PELÍCULAS DELGADAS DE POLÍMEROS CONDUCTORES

##### **Poli(3,4-etilendioxitofeno):poliestireno sulfonado (PEDOT:PSS) con aditivos de alto punto de ebullición.**

Se ha estudiado la interacción entre el poli(3,4-etilendioxitofeno):poliestireno sulfonado (PEDOT:PSS) y aditivos de alto punto de ebullición en dispersiones acuosas de PEDOT:PSS y en las películas poliméricas finales, con el fin de establecer correlaciones entre la estructura de las tintas y de las películas delgadas sólidas. Mediante dispersión de rayos X a bajo ángulo (SAXS) utilizando radiación sincrotrón, se observó que los cambios estructurales de las dispersiones de PEDOT:PSS al añadir aditivos de alto punto de ebullición pueden explicarse mediante un mecanismo de dos etapas que depende de la concentración del aditivo: una compactación de los granos de PEDOT:PSS a bajas concentraciones, mientras que a altas concentraciones se observó un hinchamiento de los granos junto con una segregación de fase entre los segmentos de PEDOT y PSS. La morfología y estructura de las películas delgadas se investigaron mediante microscopía de fuerza atómica (AFM) y dispersión de rayos X con incidencia rasante a alto ángulo (GIWAXS). El modelo expuesto de dos pasos explica la aparición de dominios pequeños y bien definidos en las películas delgadas de PEDOT:PSS con bajas concentraciones de aditivos, mientras que películas con mayores concentraciones de aditivos presentan dominios más grandes y una mayor rugosidad. También se observó una reducción de la proporción de PSS en las películas delgadas de PEDOT:PSS en presencia de aditivos. Lo cual está relacionado con un adelgazamiento de la capa externa de PSS de los granos de PEDOT:PSS en la dispersión. Los resultados discutidos en este trabajo proporcionan la base para el control de la estructura de las películas delgadas de PEDOT:PSS y de sus propiedades eléctricas.

##### **Mezclas de PEDOT:PSS y polióxido de etileno (PEO).**

Se han investigado películas delgadas de mezclas de PEDOT:PSS y polióxido de etileno (PEO), variando la concentración de los dos componentes en todo el rango de composiciones y el peso molecular del PEO. Se han estudiado la separación de fases y la cristalización a diferentes escalas de longitud combinando la microscopía de fuerza atómica (AFM) y la dispersión de rayos X a ángulo alto con incidencia rasante (GIWAXS). Se observaron diferentes morfologías dependiendo de la concentración de los dos componentes. Además, hemos estimado cuantitativamente las propiedades nanomecánicas y nanoeléctricas mediante AFM, así como la dependencia de dichas propiedades con la composición y la estructura de las películas delgadas.

Variando la composición de la mezcla, se consigue diferente capacidad de recubrimiento, propiedades mecánicas y conductividad eléctrica. Además, en función del peso molecular del PEO la respuesta eléctrica de las películas delgadas resultantes es diferente. En el rango de baja concentración de PEO, las películas delgadas con PEO de alto peso molecular presentan caminos conductores más anchos que las homólogas de bajo peso molecular. Para concentraciones intermedias, se observa una segregación de fases de PEDOT:PSS y PEO más eficaz en el caso del PEO de alto peso molecular. Estas diferencias también se traducen en una conductividad eléctrica diferente.

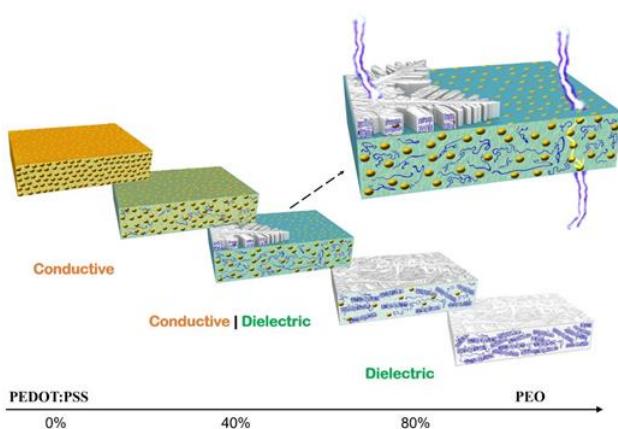


Figura 1. Esquema mostrando la morfología de películas de PEDOT:PSS/PEO en función de la concentración de PEO, y su influencia en las propiedades eléctricas.

## MICROPATRONES FUNCIONALES SOBRE SUBSTRATOS ELÁSTICOS OBTENIDOS MEDIANTE DEFORMACIONES

En este trabajo demostramos la fabricación de micropatrones funcionales sobre sustratos elásticos, en concreto polidimetilsiloxano (PDMS). Los micropatrones rígidos se han fabricado mediante ozonización del PDMS sometido a presión. El patrón superficial formado depende directamente de la presión aplicada, las propiedades mecánicas del sustrato elástico, así como de las dimensiones y forma de la máscara empleada para definir las áreas expuestas y no expuestas. Además del patrón formado, otro aspecto interesante está relacionado con la difusión del ozono dentro del material. El PDMS con módulo de Young menor permite una difusión más eficiente y produce una capa oxidada más gruesa en comparación con el PDMS rígido. Los resultados experimentales obtenidos se compararon con simulaciones sobre la distribución de tensiones de Von Misses para placas sólidas, lo que ha permitido encontrar las condiciones en las que la fuerza aplicada resulta en la ruptura de la capa rígida oxidada bajo una deformación permanente.

## CRISTALIZACIÓN *IN SITU* Y EN MODO *OPERANDO* DE POLÍMEROS DURANTE IMPRESIÓN 3D MEDIANTE DISPERSIÓN DE RAYOS X CON LUZ DE SINCROTRÓN

Hemos investigado la cristalización del polímero termoplástico poli(fluoruro de vinilideno) (PVDF) durante un proceso de impresión 3D en modo *operando*. Se realizaron experimentos simultáneos de dispersión de rayos X a ángulos grandes y pequeños (WAXS-SAXS) a través de la línea impresa con una resolución de 50 μm mediante un sistema experimental optimizado al efecto (Figura XX). Los experimentos indican que la cristalización es más rápida en la interfase polímero-aire que en otros puntos dentro de la línea impresa. La orientación de las laminillas cristalinas es más alta en ambas interfaces, lo que sugiere una tasa de cizalla más alta que en la mayor parte de la línea impresa donde el flujo de elongación es dominante. Los niveles finales de cristalinidad en las diferentes ubicaciones de la línea impresa son relativamente bajos, en comparación con los valores informados en las muestras prensadas en estado fundido debido a la cinética de cristalización extremadamente rápida involucrada en la solidificación de las líneas impresas. Por lo tanto, se espera que las piezas de PVDF impresas en 3D muestren modificaciones estructurales significativas debido a la posible cristalización que eventualmente ocurrirá durante el almacenamiento a temperatura ambiente debido a que la transición vítrea del PVDF está muy por debajo de la temperatura ambiente.

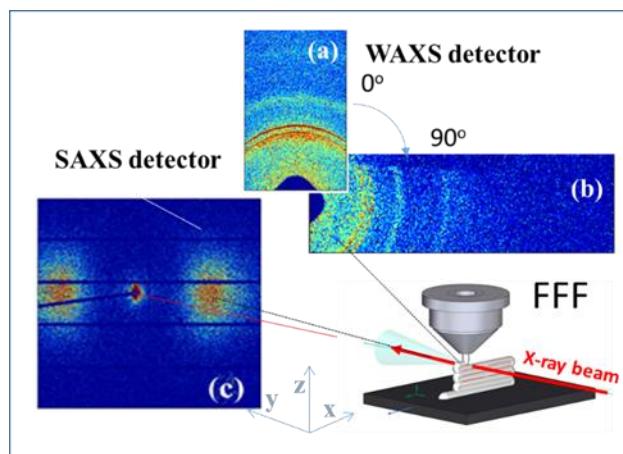


Figura 2. Esquema para “operando” experimentos SAXS/WAXS simultáneos con radiación sincrotrón. Un haz de rayos X llega a la muestra en una posición particular. La intensidad de las WAXS difractadas (a y b) se registra mediante un detector ubicado cerca de la muestra. La intensidad dispersada de SAXS es recolectada por el detector SAXS ubicado a una distancia mayor de la muestra.

## Grupo de BIOFÍSICA DE SISTEMAS MACROMOLECULARES (BIOPHYM)

### Aspectos generales de la investigación.

Hemos ahondado en la actividad experimental y de simulación en el proyecto “*Eco-diseño de envases basados en polímeros convencionales mediante modelización multiescala validada*” concedido por el MCINN a mediados del año 2020. Así mismo hemos comenzado actividades de colaboración en el marco de dos proyectos de Transición Ecológica y Digital (TED), uno de ellos con la Universidad Rey Juan Carlos e IMDEA Energía, y el otro con la Estación Experimental del Zaidín del CSIC (Granada) y la Universidad de Sevilla. Ambos proyectos se circunscriben en el ámbito del reciclado de polímeros y el desarrollo y la caracterización de biopolímeros de origen natural. También continuamos investigando sobre los tratamientos para el cáncer de mama metastásico con anticuerpos monoclonales, proyecto que se realiza al amparo de un contrato con la Fundación del Hospital Vall d’Hebrón. También se ha establecido un nuevo contrato de investigación con la Fundación Contigo contra el cáncer de mama, sobre el estudio “*in silico*” de anticuerpos monoclonales conjugados. Se han desarrollado dos contratos de colaboración con la empresa internacional Total Energies. Hay que destacar la actividad desarrollada en colaboración con investigadores del ICTP, de la UAH, y de la UPV/EHU. A continuación, se describen las actividades y resultados principales obtenidos en los diferentes proyectos.

## **Proyecto “Eco-diseño de envases basados en polímeros convencionales mediante modelización multiescala validada”.**

El objetivo principal de este proyecto es establecer un protocolo de modelización multiescala que describa las distintas interacciones de los polímeros que se encuentran en los materiales multicapa. Se ha desarrollado un flujo de trabajo para estudiar materiales multicapa, implementándolo en el lenguaje de programación Python. El flujo cubre desde los primeros pasos de preparación de estructuras para el cálculo, la equilibración y simulación del material así como el análisis de los resultados obtenidos. Este flujo se ha aplicado con éxito al estudio de los materiales multicapa formados por polietileno y polipropileno sin y con la presencia de un copolímero en bloque (PE/PP) que pueda actuar como compatibilizante. En el caso de polímeros polares, los potenciales de interacción no son los suficientemente precisos y en estos momentos se están desarrollando modelos basados en DFT para la obtención de nuevos parámetros, que se validarán con información experimental.

Por otro lado, se ha estudiado la naturaleza e intensidad de las interacciones entre distintos componentes de los sistemas multicapa desde el punto de vista experimental, tanto entre polímeros apolares (olefínicos), como en sistemas polares. El estudio de la depresión de la temperatura de fusión en sistemas de estructura cristalina controlada (monocristales) en presencia de otros polímeros, se manifiesta como una técnica muy poderosa para determinar la fortaleza de interacciones. Las simulaciones por ordenador están en perfecto acuerdo con los resultados experimentales, en el caso de los sistemas apolares. Esta aproximación ya da las primeras pistas sobre un diseño inteligente de los sistemas multicapa para un existoso posterior reciclado. En este mismo contexto se ha llevado a cabo una colaboración con el ICTP, sobre el estudio de polímeros adhesivos que funcionen como “tie layers” reversibles que favorezcan la separación de las distintas capas de los productos multilaminados al final de su vida útil. Las propiedades reológicas, unidas a la nanoindentación, dan pistas sobre las composiciones más adecuadas para lograr un diseño efectivo de los adhesivos reversibles.

## **Proyecto sobre Estudio de la interacción de HER2-Anticuerpos Monoclonales.**

En colaboración con el Hospital Vall d'Hebron y la Fundación "Contigo contra el cáncer de mama", se están estudiando las características biofísicas de la interacción entre el receptor de membrana HER2, cuya sobreexpresión en células se asocia a los tumores más agresivos, y anticuerpos monoclonales específicos (mAbs) para esta diana proteíca. En los últimos años, se han desarrollado terapias exitosas contra el cáncer de mama basadas en estos mAbs. Específicamente, dos mAbs conocidos como trastuzumab y pertuzumab se están utilizando en terapias para el cáncer de mama avanzado o metastásico. Ambos anticuerpos se dirigen a diferentes dominios del receptor HER2, por lo que también se utilizan en terapias combinadas. En nuestro grupo hemos explorado la afinidad entre cada uno de esos mAbs y HER2 estimando la energía libre de asociación ( $\Delta G_{binding}$ ) tanto experimentalmente como mediante técnicas "in-silico". Los resultados muestran una afinidad similar por trastuzumab y pertuzumab en su interacción con el dominio extracelular de HER2. También se ha observado que la biomolécula pertuzumab es capaz de asociar dos receptores HER2, mientras que trastuzumab asocia preferentemente una copia de este receptor.

## **Materiales poliméricos con topologías macromoleculares novedosas.**

Esta línea de investigación surge de la colaboración con una empresa internacional líder en el desarrollo de nuevos materiales “commodities”. Se han diseñado y aplicado nuevos experimentos y modelos teóricos a una serie de materiales de nueva síntesis de arquitectura molecular desconocida. Esta idea surge de la imposibilidad de determinar dicha arquitectura mediante técnicas convencionales. En concreto, esta colaboración se articula en tres actividades genéricas: (i) la obtención de las propiedades reológicas en régimen lineal y no lineal, (ii) la aplicación de modelos computacionales teóricos que permitan determinar la arquitectura molecular correspondiente, y (iii) la identificación de las topologías macromoleculares específicas determinantes de las propiedades medidas. Los resultados, muy prometedores, apuntan a una arquitectura molecular única, que genera propiedades reológicas específicas no vistas antes en este tipo de materiales. Esta investigación forma parte de un proyecto de tesis doctoral que ha comenzado a desarrollarse en nuestro grupo de investigación recientemente.

## **COLABORACIÓN CON OTROS GRUPOS DE INVESTIGACIÓN**

Con el *Departamento de Química Orgánica e Inorgánica, de la Universidad de Alcalá de Henares*, se está colaborando en un proyecto de innovación docente titulado “Visualiza la simetría”. Nuestro grupo está realizando una aplicación web para que los alumnos puedan visualizar y manipular moléculas en función de su diferente simetría. Se han publicado varios videos en el canal Youtube de la Universidad de Alcalá y la página web <http://symmetryuh.epizy.com/> (dirección no definitiva). En colaboración con el Prof. Gerardo Jiménez de este departamento se han realizado cálculos DFT en el estudio de “Nuevos catalizadores de titanio con ligandos polidentados” que han servido como material en el Trabajo de Fin de Grado de Valeria Hipólito Barriuso. También se ha colaborado con las Dras. Vanessa Tabernero y Marta E.G. Mosquera, en el ámbito experimental, sobre el estudio de nuevos materiales obtenidos mediante procesos de síntesis novedosa, así como de fuentes sostenibles como el polimirceno y el polianetol. Se han logrado sintetizar sistemas en forma de nanopartícula, utilizando un proceso de síntesis dual, biocompatibles y con posibles aplicaciones en biotecnología. Las propiedades reológicas han resultado ser muy interesantes. Las curvas maestras reológicas presentan una relajación viscoelástica característica con ausencia de meseta elástica, lo que indica que los sistemas se comportaron como polímeros no enmarañados. El análisis de

la huella viscoelástica lineal revela una dinámica de Zimm en frecuencias intermedias típicas de los sistemas no enmarañados. Este comportamiento se asemeja al observado en estrellas altamente funcionalizadas, dendrímeros, coloides blandos y microgeles. Por otro lado, se están llevando a cabo estudios sobre las propiedades de estos materiales novedosos, se está explorando su aplicabilidad como materiales plastificantes del poliácido láctico (PLA), un material de gran interés dada su biodegradabilidad y su origen no dependiente del petróleo.

Colaboramos con investigadoras del **Centro de Astrobiología del CSIC – INTA** en el estudio molecular y estructural de polisacáridos de origen natural, obtenidos de biopelículas extremófilas de Río Tinto. Se están realizando estudios sobre la caracterización de las propiedades moleculares y conformacionales de polisacáridos obtenidos de distintos tipos de microorganismos extremófilos, resistentes a medios ácidos. Los resultados apuntan hacia unos pesos moleculares muy elevados de estos biopolímeros, en consonancia con las propiedades reológicas obtenidas previamente en las biopelículas de origen.

Con el **POLYMAT y el Departamento de Biología Celular e Histología, de la Universidad del País Vasco** colaboramos en el estudio microrreológico de lágrimas artificiales. Se están realizado investigaciones sobre la aplicación de la técnica de microrreología pasiva por dispersión de luz en medicamentos aplicados al ojo seco (lágrimas artificiales). También se ha explorado la posibilidad de aplicar esta técnica a las lágrimas naturales. Los resultados se han presentado en la *Conferencia Europea de Reología de 2022*, celebrada en Sevilla. Las medidas microrreológicas se están comparando con medidas reológica mecánicas realizadas por nuestras colaboradoras en el POLYMAT.

Con la **Secretaría General Adjunta de Informática del CSIC** se esta colaborando en la implementación y puesta a punto de software de cálculo científico en el nuevo Sistema de Alto Rendimiento “Drago” para la comunidad científica del CSIC.

## *Chapter 2B*

### **RESEARCH ACTIVITIES**

## 2B.1. THEORETICAL PHYSICS AND CHEMISTRY DEPARTMENT

### RESEARCH LINES:

- Gravitation and Cosmology.
- Condensed Matter Theory.
- Theoretical Nuclear Physics: Structure and Reactions.
- Theoretical molecular physics applied to the study of astrophysical species and to the characterization of atmospheric pollutants.

### RESEARCH SUBLINES:

- Loop Quantum Gravity and Cosmology.
- Classical and Quantum General Relativity.
- Black Holes Physics.
- Non-Local Quantum Gravity.
- Gravitational waves.
- Strongly correlated and mesoscopic systems.
- Quantum dissipative systems.
- 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.
- Theoretical spectroscopy applied to the study of relevant astrophysical and atmospheric non-rigid molecules.
- Formation of volatile organic compounds from organic radicals.
- Photodissociation of organic radicals.

### EMPLOYED TECHNIQUES:

- Theoretical and mathematical Physics.
- Perturbative field theory and renormalization group.
- Computational methods.
- Selfconsistent mean field calculation techniques.
- Numerical methods to solve the Faddeev equations in coordinate space.
- Hyperspherical adiabatic expansion method.
- Highly correlated ab initio calculations and new computational tools.

### RESEARCH ACTIVITY:

#### GRAVITATION AND COSMOLOGY

##### Loop Quantum Cosmology

The Gravitation and Cosmology Group has continued its work on the application of Loop Quantum Gravity to cosmology, and has developed new applications to black hole physics. Quantum ambiguities have been studied that, within the framework of Loop Cosmology, could affect the effective equations that govern the dynamics of primordial perturbations in the Very Early Universe. These ambiguities could modify the consequences of the theory for observable cosmological quantities, such as the power spectrum and the correlation functions of the cosmological radiation background. It has been shown how to choose quantization prescriptions in such a way that these problems are avoided. These results are important to give robustness to the potentially falsifiable predictions of Loop Quantum Cosmology. In addition, the Group has studied the properties of the effective mass of the primordial perturbations around the quantum bounce that occurs in Loop Quantum Cosmology, when the inflaton potential is of the exponential or Starobinsky type. These two cases are of special interest, either because they allow analytical treatments in inflation (in the first case) or because they are supported by current cosmological observations (in the second case). It has been shown that the effective mass is generally positive if one adopts the hybrid quantization formalism in Loop Quantum Cosmology, a formalism that was proposed and has been elaborated by

the IEM Group. This positivity prevents the appearance of instabilities and allows the application of criteria for the choice of vacuum state that are well developed in Quantum Field Theory in curved spacetimes.

Concerning black holes, the Group has carried out a complete analysis of the effective model proposed by Ashtekar, Olmedo, and Singh for the geometry of nonrotating black holes in the framework of Loop Quantum Gravity. The techniques used in this analysis are totally similar to those of Loop Quantum Cosmology, a fact that shows their flexibility and power. The Hamiltonian formulation of the model has been thoroughly studied, showing that a Hamiltonian deduction of its dynamics is possible at the cost of introducing a two-time formalism for the description of the metric. The resulting geometry for the interior of the black hole has been discussed, showing that it is acceptable but that it has a physical behavior very different from that expected from the work of Ashtekar, Olmedo and Singh. As an alternative, it has been proved that it is also possible to derive the same effective dynamic equations if the phase space of the system is extended, including quantization parameters in it. In this way, the geometric behavior does have the good properties described in the original work mentioned above. However, the reduction of this extended system to the starting geometric variables turns out to modify the canonical structure. The effective solutions of the model have been obtained, correcting errors from the studies by Ashtekar, Olmedo and Singh. Once the space of solutions is known and the thermodynamics of black holes in it has been discussed (thermodynamics which allows modified Hawking temperatures with respect to the Einsteinian case), the quantization has been carried out using Loop Cosmology techniques. In this way, a quantum model of nonrotating black holes has been obtained for the first time in the framework of Loop Quantum Gravity with good effective properties. The physical states of the system have been determined and it has been shown that a good behavior is recovered for states with large black hole mass. These results may open a new avenue to study quantum black holes and the analysis of their gravitational radiation, with applications to gravitational waves emitted in the last phases of coalescence events.

### **Non-local quantum gravity**

The Gravitation and Cosmology Group is one of the most active at the international level in the study of non-local quantum gravity, both with asymptotically polynomial and fractional operators. These are unitary and renormalizable perturbative field theories. The main advance in 2022 for the theory with asymptotically polynomial operators has been the construction of an early-universe scenario alternative to cosmic inflation, which solves the problems of the hot-big-bang model and predicts a tensor-to-scalar ratio so high that it can be observed within five years by BICEP Array. It is a prediction directly from quantum gravity, unique in the literature. Concerning fractional gravity, an approach proposed by the Group since 2010 and crucially advanced in 2021, on one hand has led to a model allowing one to explain the galaxy rotation curves through geometric effects, without the need to introduce dark matter. On the other hand, a complete theory of quantum gravity has been formulated and it has been shown that it is unitary and renormalizable. With this aim, a new formalism has been developed to deal with general configurations of branch cuts in the complex plane. Thanks to these results, the fractional theory has been receiving a growing interest in the scientific community. Last, a multiauthor review on the phenomenology of quantum gravity published in 2022 has already received more than 160 citations.

### **Gravitational waves**

The Gravitation and Cosmology Group is one of the external groups of the LISA Consortium and is composed by one full and one associate member, plus an external associate. In May 2022, the LISA mission has officially entered the ESA phase B1 of development, which entails more intense work to precisely define the scientific objectives of the mission. Two white papers have been published in Living Reviews in Relativity which have already gathered more than 120 citations. In another article of the collaboration, prepared for one of the Work Packages, gravitational waves have been studied in models of alternative gravity with momentum-dependent propagation speed.

### **Geometric methods in gravitation**

Part of the Gravitation and Cosmology Group (Fernando Barbero and his collaborators at the Universidad Carlos III and Memorial University, Saint John) has continued with the application of geometric methods to the study of the Hamiltonian formulation of field theories, in particular those related to general relativity. During the year they have used both canonical and covariant approaches to study field theories in manifolds with boundaries. They have also discussed the abelianization of gravitational theories as a first step towards their eventual perturbative quantization. Finally, they have started a program to understand issues related to the regularization of quantum field theories by introducing appropriate functional spaces and taking advantage of their mathematical structures.

Regarding the use of covariant Hamiltonian methods for field theories with boundaries, the known results on the equivalence of some gravitational theories have been extended to include non metricity and torsion in manifolds with timelike boundaries both in the metric and the tetrad formulations. In particular, the equivalence of their solution spaces with the one derived from the Palatini action has been proved. By relying on the relative bicomplex framework, the considered Palatini and generalized Holst Lagrangians have been shown to have equivalent covariant phase spaces and charges. Similar methods have been used to study some field theories that play an important role in condensed matter physics, in particular the Maxwell-Chern-Simons model.

An interesting approach suggested in 1992 by Smolin and recently reconsidered by other authors (Varadarajan, Thiemann et. al.) proposes an avenue to the quantization of gravity that relies on the abelianized selfdual action for General Relativity. The main idea is to use it (if solvable) as the starting point for a perturbative approach. As a way to gain further insights on the practical applications of such a method, several actions (Cartan-Palatini, Holst, Husain- Kuchař and the self dual actions) have been studied to check if they are consistent deformations of their abelianized counterparts. The performed analysis shows that the self dual and Husain- Kuchař actions work well in this regard, whereas the Palatini or Holst action are pathological (for instance, their abelianized counterparts do not have local degrees of freedom).

Finally, a discussion has been carried out on the computation of Poisson brackets for field theories described in well controlled functional settings (Sobolev spaces) and it has been shown that many problems that crop up in the standard formulations are a consequence of the use of inappropriate definitions of functional derivatives. In this regard, a careful understanding of the concept of differentiable function is very important.

## CONDENSED MATTER THEORY

### Symmetry breaking and superconductivity of twisted graphene multilayers

The observation of superconductivity in twisted graphene multilayers has been one of the most remarkable discoveries carried out in recent years, in the context of condensed matter physics. Such a phenomenon was found first in twisted bilayer graphene, at the so-called magic twist angle, but it has shown to be a robust feature of more general twisted multilayers, as it has been also observed in twisted trilayer, quadrilayer, and pentalayer graphene. In this regard, we have developed a numerical Hartree-Fock approach in real space to describe the electronic properties of those systems, focusing on symmetry broken phases and their relation with the superconductivity found at the magic angle.

We have devised a self-consistent procedure by which the eigenvalues and eigenvectors of the static electron propagator are obtained by recursive iteration of the Hartree-Fock approximation. We have found that such a scheme shows good convergence when implemented in real space, despite the large number of carbon atoms contained in the unit cell of twisted graphene multilayers at the magic angle. This approach has allowed us to determine the phase diagrams of twisted bilayer, trilayer, and quadrilayer graphene, which show very similar features like the ubiquitous presence of a phase with valley symmetry breaking and concomitant time-reversal symmetry breaking.

We have unveiled a universal mechanism of spin-valley locking in the twisted graphene multilayers by which the two sectors with different spin projection display opposite signs of the valley polarization. This leads to ground states where the two spin projections sit preferentially at opposite valleys, implying that the electron system may develop a so-called Ising superconductivity, with the spins locked in the out-of-plane direction. We have put forward the idea that this mechanism may explain the observation of superconductivity in the twisted multilayers under unusually large in-plane magnetic fields. Moreover, we have also shown that the phenomenon of valley symmetry breaking confers great anisotropy to the low-energy electronic bands, leading to channels where the effective interaction may become attractive. We have thus built a unified framework accounting for the essential features of the superconductivity in twisted bilayer, trilayer and quadrilayer graphene, which stem from the phenomenon of dynamical symmetry breaking conveniently captured in our self-consistent Hartree-Fock approximation.

### Quantum Dissipative Systems

We study a model of a quantum collective spin weakly coupled to a spin-polarized Markovian environment. This model has applications to quantum cavity electrodynamics, a magnetic grain over a metallic surface and quantum superconducting circuitis. We find that the spectrum is divided into two regions that we name normal and exceptional Liouvillian spectral phases. In the thermodynamic limit, the exceptional spectral phase displays the unique property of being made up exclusively of second-order exceptional points. As a consequence, the evolution of any initial density matrix populating this region is slowed down and cannot be described by a linear combination of exponential decays. This phase is separated from the normal one by a critical line in which the density of Liouvillian eigenvalues diverges, a phenomenon analogous to that of excited-state quantum phase transitions observed in some closed quantum systems. In the limit of no bath polarization, this criticality is transferred onto the steady state, implying a dissipative quantum phase transition and the formation of a boundary time crystal. We demonstrate that the model presents and exceptionally rich phenomenology, even if it is possible to solve it exactly.

## Magnetic topological insulators

A quantum anomalous Hall state with a high Chern number has so far been realized in multilayer structures consisting of alternating magnetic and undoped topological insulator (TI) layers. However, in previous proposals, the Chern number can only be tuned by varying the doping concentration or the width of the magnetic TI layers. This drawback largely restricts the applications of dissipationless chiral edge currents in electronics since the number of conducting channels remains fixed for each sample. In this paper, we propose a way of varying the Chern number at will in these multilayered structures by means of an external electric field applied along the stacking direction. In the presence of an electric field in the stacking direction, the inverted bands of the unbiased structure coalesce and hybridize, generating new inverted bands and collapsing the previously inverted ones. In this way, the number of Chern states can be tuned externally in the sample, without the need for modifying the number and width of the layers or the doping level. We showed that this effect can be uncovered experimentally by the variation of the transverse conductance as a function of the electric field at constant injection energy at the Fermi level.

## THEORETICAL NUCLEAR PHYSICS

### Beta-decay in neutron-deficient odd-Hg isotopes

We have studied theoretically bulk and decay properties of odd-A neutron-deficient mercury isotopes (183-187Hg). The study includes decays of both ground and isomeric states. We start from a theoretical approach based on a selfconsistent deformed mean-field calculation with Skyrme forces and pairing correlations. The various equilibrium shapes that minimize the energy are obtained from constrained calculations. Mean square charge radii (r.m.) and magnetic dipole moments are given and compared successfully with the available experimental information. An even-odd radius staggering is found in the isotopic chain between 181Hg and 188Hg, in agreement with experimental data, where the odd-A isotopes 183Hg and 185Hg have larger radii than their even-A neighbors. This effect can be related to an alternation of the nuclear equilibrium shape. The ground-state bulk properties are compatible with a prolate shape in the odd-A isotopes and with an oblate one in the even-A isotopes. Next, we analyze the decay properties including half-lives and energy distributions of the Gamow-Teller (GT) strength. The results are obtained by introducing spin-isospin correlations within pnQRPA approach for different equilibrium shapes and odd-nucleon states, including those compatible with the experimental ground and isomeric states. The interpretation of the results is a complex problem and a challenge for theory because both partners involved in the beta-decay process are immersed in transitional regions, where shapes are changing between neighbors and are mixed in each nucleus. However, the GT strength distributions which will be measured at ISOLDE/CERN using total absorption gamma-ray spectroscopic techniques contain valuable information that will allow for the identification of signatures of deformation and of the spin and parity of the decaying nuclei.

### Theoretical analysis of the beta-decay in 70Kr

Recent experimental measurements of positron-emission beta-decay in 70Kr performed at RIKEN (Japan) have been analyzed by means of a nuclear structure model based on self-consistent mean-field calculations implemented with Skyrme effective interactions that include QRPA and pairing correlations. The interest of this decay is twofold. First, this is the heaviest system studied experimentally that decays into a N=Z nucleus (70Br) and therefore, information on isospin symmetry as well as on proton-neutron (pn) pairing can be obtained. In particular, one of the expected signatures of pn pairing in the T=0 channel is the enhancement of the low-lying Gamow-Teller (GT) strength. Second, this study is also interesting from a pure nuclear structure point of view. In fact, the decay takes place in a mass region which is characterized by sudden changes of the nuclear shape involving shape coexistence phenomena. Nuclear deformation is a key ingredient in the description of these nuclei and it should definitely be included for a proper interpretation of the experimental data. The theoretical results are in good agreement with the measured energy distribution of the GT strength. However, both oblate and prolate configurations produce similar results and the data are not able to discriminate between them. Relative to the observed beta-decay of the lighter N=Z+2 nucleus, 62Ge, the GT strength to the lowest 1+ state in 70Br is clearly enhanced, which would indicate a partial restoration of the SU(4) symmetry.

### Competition between alpha and beta decay modes in superheavy nuclei

The competition between beta+/EC and alpha-decay modes is studied systematically in nuclei along the alpha-decay chains that follow the synthesis of superheavy nuclei with Z=119 and Z=120. A microscopic approach based on deformed self-consistent Skyrme Hartree-Fock mean-field calculation with pairing correlations is used to describe the beta+ and electron capture weak decays, whereas the alpha-decay is estimated from existing phenomenological expressions. It is shown that alpha-decay is in most cases the dominant decay mode, but interesting instances are identified where the half-lives are comparable, opening the possibility of new pathways towards more neutron-rich nuclei closer to the predicted islands of stability.

In particular, it is found that weak decays increase progressively their relative importance when one moves to lower values of the atomic number ( $Z < 108$ ) in a given chain, as well as when one moves to alpha-decay chains with lower values of the difference between neutrons and protons ( $N-Z < 55$ ). In fact, these calculations have identified interesting regions where the beta+/EC decay is faster than the alpha-decay.

### **Confinement of two- and three-body systems by an external field**

All along this year we have used the recently developed d-method to investigate two- and three-body systems under the influence of an external confining potential. Within this method, the dimension d is taken as a parameter, which can vary continuously from  $d=3$  to  $d=2$ . The effect of the confining potential is then contained in the d-dependent centrifugal barrier. This method is precise and correct in the two limits, i.e., for  $d=3$  and  $d=2$ .

In particular, for two-body systems we have investigated wave functions, phase shifts, and elastic cross sections. The two-body interaction is assumed to be short-range. Using a square-well potential, we have derived analytic expressions for scattering lengths and phase shifts. We have also introduced the critical dimension,  $d_E$ , which corresponds to the squeezing scenario such that the two-body scattering length is equal to infinity. This is the situation where the Efimov effect can show up after addition of a third particle. We have given explicitly the equivalent continuum wave functions in d and ordinary three-dimensional space, and show that the phase shifts are the same in both methods. Consequently, the d-method can be used to obtain low-energy two-body elastic cross sections in an external field.

Following the same scheme, we have also investigated the case of three-body systems, focusing as well on the continuum structures of three short-range interacting particles in a deformed external field. We focus on dimensions close to the critical dimension,  $d = d_E$ , between 2 and 3, defined by zero two-body energies, where the Efimov effect can occur. We have then designed for this dimension region a schematic, long-distance realistic, square-well based, three-body spherical model, which is used to derive analytic expressions for the wave functions, scattering lengths, phase shifts, and elastic- scattering cross sections. The procedure and the results are universal, valid for all short-range potentials, and for large scattering lengths. We have discussed as well the properties and validity of the derived expressions by means of the simplest system of three identical bosons. We have found that the derived expressions are particularly useful for very small energies, where full numerical calculations are often not feasible. For energies where the numerical calculations can be performed, a good agreement with the analytic results is found. These model results may be tested by scattering experiments for three particles in an equivalent external deformed oscillator potential. The cross sections all vanish in the zero-energy limit for  $d < 3$  with definite d-dependent power of energy.

### **Beta-decay of two-neutron halo nuclei**

During this year we have also investigated the beta decay of two-neutron halo nuclei. More specifically, we have developed a novel and practical few-body method that is formulated in order to include isospin symmetry for nuclear halo structures. The method is designed to describe beta decay, where the basic concept of isospin symmetry facilitates a proper understanding. Both isobaric analogue and anti-analogue states are treated. We have derived general and explicit formulas for three-body systems using hyperspherical coordinates. The example of the beta decaying  $^{11}\text{Li}$  ( $^9\text{Li}+\text{n}+\text{n}$ ) is chosen as a challenging application for numerical calculations of practical interest. The detailed results are compared to existing experimental data and good agreement is found at high excitation energies, where the isobaric analogue and anti-analogue states are situated in the daughter nucleus. An interpretation of the decay pattern at lower excitation energies is suggested. Decays of the  $^9\text{Li}$ -core and the two halo-neutrons are individually treated and combined to the daughter system with almost unique isospin, which we predict to be broken by about 0.4% probability. Properties of decay products are predicted as possible future tests of this model.

## **THEORETICAL MOLECULAR PHYSICS APPLIED TO THE STUDY OF ASTROPHYSICAL SPECIES AND TO THE CHARACTERIZATION OF ATMOSPHERIC POLLUTANTS**

The research carried out in 2022 is inserted in the project H2020-MSCA-RISE-2019-ATMOS-872081 “*Pollutants and greenhouse gases in the atmosphere - understanding gas-gas and gas-solid interactions towards a cleaner atmosphere* (ATMOS)”. This project is coordinated from the Instituto de Estructura de la Materia (IEM-CSIC) and from the Theoretical Chemistry group of the Department of Theoretical Chemistry and Physics in collaboration with the Associated Unit with the University of Huelva (Fig.1).

ATMOS is an international network funded by a Marie Curie Action for the Exchange of Researchers (RISE). The main objective is the study of scientific problems related to the elements of air pollution, with emphasis on the training of graduate students in atmospheric sciences. The network is composed of eleven scientific groups and 31 senior scientists. Within this environment, several students from the groups integrated in ATMOS have visited the IEM-CSIC.

ATMOS focuses on abundant species ( $O_3$ , HCHO,  $HO_2$ ,  $NH_3$ , ...) and their radicals, that have not been fully characterized, and on oxygenated volatile organic species (OVOCs) containing internal rotation groups and their radicals. Basically, the scientific work of the IEM partners concerns the identification and reactivity of OVOC's and organic radicals. The understanding of the processes involving organic compounds in the atmosphere depends on how well these compounds are identified. Quantitative spectroscopic line-by-line modelling in the infrared range (IR) is needed for the current and future atmospheric observations with large scale instruments. Thus, in order to understand their effects in the atmosphere, structural and spectroscopic parameters of such molecular species are needed. Such studies require a large scientific effort focused on the characterization of both known and new species and on the knowledge of the chemical evolution of gas phase sources, of the photochemical induced processes and radical cycles. In the IEM, the main tool for molecular characterization are highly correlated ab initio calculations as well as original Fortran codes for the determination of spectroscopic properties.

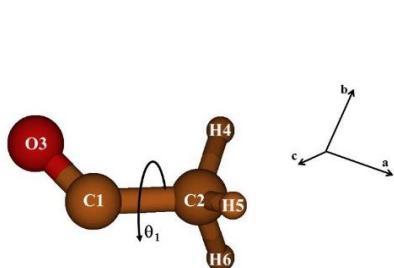


Fig 1

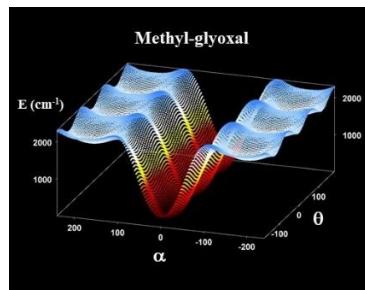


Fig 2

Another important objective is the reactivity. Atmospheric organic pollutants can act as precursors for chemical reactions which can produce free radicals. The study of atmospheric radical cycles presents important challenges as radical cycles are not well understood. Systematic studies of the precursor organic gases and their properties are vital. Although many processes involve only the ground electronic states, some radical formation and dissociation processes implicate electronic excitation in the UV and visible regions, the identification of the Rydberg and dissociative electronic states probed require collaboration between experiments and theory. The tools for reactivity are highly correlated ab initio calculations, density functional theory, and Fortran codes for the determination of kinetic rates.

During 2022, spectroscopic and structural properties have been studied at the IEM-CSI, with an emphasis on the internal rotation of methyl groups. We attend to several ketones that are classified as Volatile Organic Compounds (VOCs), and several organic radicals that can be considered fragments of these ketones and can participate in reactive processes (Fig 1). These molecules contribute to an increase in tropospheric ozone and are therefore monitored as pollutants. In this way, acetone, biacetyl, acetium and vinyl radicals, methyl glyoxal (Fig 2), methyl vinyl ketone, methyl ethyl ketone, as well as some alcohols (isopropyl alcohol, methoxymethanol) and some peroxides ( $CH_3COOOH$ ,  $CH_3OOCH_3$ ) have been studied.

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

### RESEARCH LINES:

- Experimental Nuclear Physics.
- Nuclear Structure studied at intermediate energies.
- Study of excited states and nuclear resonances.
- Nuclear Structure studied in reactions with stable and exotic nuclei at low, medium and relativistic energies.
- Study of exotic hyper-matter.
- Particle tracking and vertexing methods for high energy nuclear physics experiments.
- Research on machine and deep learning applied to experimental nuclear spectroscopy.
- Computing simulations using R3BRoot for nuclear physics experiments.
- Systems devoid of long-range order.
- Nano-Photonics.
- Plasmonics and Metamaterials.
- Surface-Enhanced Spectroscopy (SERS, SEF and SEIRA) of molecular systems.
- Nanosensors.
- Spectroscopic techniques applied to the study of materials of interest for the Cultural Heritage.
- Design of ecomaterials.
- Toxicological analysis by spectroscopical techniques.
- Underwater Heritage.

### 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.
- In-flight spectroscopy of light hypernuclei and exotic hypernuclei.
- Spectroscopy mesonic nuclei.
- R&D in particle tracking and reconstruction in high energy nuclear physics.
- I+D in micro-vertex detectors.
- 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.
- Localized Plasmon Resonances in metal nanostructures (nanoantennas).
- Metamaterials with HRI dielectric materials.
- Semiconductor Nanowire Photonics.
- Transparent Metamaterials.
- Topological Plasmonics.
- Nanofabrication and functionalization of plasmonic nanostructures.
- Plasmon-assisted spectroscopy characterization of biomolecules on nanostructures.
- Detection of pollutants by SERS.
- Analysis of colorants and pigments by normal vibrational spectroscopy and surface-enhanced vibrational spectroscopy.
- Computational calculations of molecular vibrational spectra.
- In situ material characterization studies.
- Sustainable cements.
- Underwater Heritage.
- Bone analysis based on the application of spectroscopic techniques, Micro-Raman and Micro-FTIR.

## 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.
- Gamma spectroscopy.
- Analysis of experiments in experimental nuclear physics.
- Electronic and mechanical design of experimental set-up.
- Spectroscopy of hypernuclei in relativistic energy ion collisions at FRS & SuperFRS at GSI.
- Track and vertex reconstruction algorithms for data analysis of nuclear collisions.
- Pytorch deep learning architectures for particle tracking, classification and observable estimations.
- Numerical simulation.
- Neutron Scattering.
- Gas adsorption techniques.
- First principles calculations.
- Theoretical and mathematical physics.
- Computational methods.
- Dispersive Raman Spectroscopy.
- Fourier-Transform Raman spectroscopy (FTRaman).
- Portable Raman Spectroscopy.
- Fourier-Transform infrared spectroscopy (FTIR).
- Infrared Attenuated Total Reflectance (ATR).
- Fluorescence Spectroscopy.
- X-Ray Fluorescence (XRF).
- X-Ray Diffraction (XRD).
- Transmission Electron Microscopy (TEM).
- Scanning Electron Microscopy (SEM).
- Energy-dispersive X-ray spectroscopy (EDX).
- Optical Spectroscopy (OM).
- Dark-Field Microscopy (DFM).

## RESEARCH ACTIVITY:

### DESIGN OF NANOSENSORS FOR POLLUTANT DETECTION

The design of sensors based on nanostructures continued to be one of the main objectives of the experimental work of our group during the year 2021. These sensors require the synthesis of nanostructures with advanced optical properties. The interaction of light of an appropriate wavelength with nanoparticles (NPs) leads to a high enhancement of the local electric field, which is the fundamental principle on which molecular detection by Raman and fluorescence enhanced by nanostructures is based. In recent years we have developed various methods for the synthesis of nanoparticles with interesting applications in spectroscopy and catalysis. Among these nanoparticles are silver nanostars, which present specific morphological properties leading to high intensification of the electromagnetic field. The use of metal nanostars was generalized to the design of all the SERS sensors highly efficient in the detection of numerous substances of environmental and biological interest, as well as pigments with interest to the Cultural Heritage.

Furthermore, the design of nanosensors implies a modification of the physical-chemical properties of the nanoparticles through their functionalization. This functionalization can be achieved by self-assembly of organic molecules on nanostructures, which allows increasing the sensitivity and selectivity of the manufactured nanostructures, resulting in high performance surfaces by combining the physical properties of the metal with the chemical properties of organic molecules self-assembled on them. In this sense, various functionalization strategies based on the use of: a) calixarenes; b) cyclodextrins and c) molecules with a cruciform structure, were carried out.

Calixarenes are characterized by having an internal cavity within which molecules difficult to detect by nanostructure-enhanced Raman spectroscopy (SERS) can lodge. During 2021, the use of new generations of calixarenes continued, characterized by presenting different points of union with metallic surfaces in their structure. These new assemblers were tested for emerging contaminants such as dioxane, glyphosate and other perfluorinated substances. These studies were carried out within the framework of the cooperation that our group maintains with researchers from the PJ Safarik University of Kosice (Slovakia) and with the company Safta Photonics. This last company has licensed the patent developed by our group

in the detection of emerging contaminants using SERS, and we are in the way to write more patents on this subject addressed to the detection of emerging pollutants.

Cyclodextrins have been used in the functionalization of nanoparticles for the detection of traces of other types of emerging contaminants such as bisphenols. The cyclodextrins used for this purpose need to incorporate thiol groups (-SH) in their structure that allow the anchoring of the macromolecule on the metal surface. Like the calixarenes, these molecules have an internal cavity with different characteristics that allow interaction with molecules that are difficult to adsorb on metals, with the additional advantage of their high biocompatibility, since they are formed by oligomers of glucose units forming cycles of 6, 7 or 8 units.

Finally, cruciform molecules are synthetic substances that have two points of union with metals and an aromatic structure in the middle. These types of molecules act by assembling two nanoparticles, generating points of high field intensification, or hot spots, for which they perform the double function of activating the nanoparticles by assembling them, and capturing the contaminant that comes to be placed precisely in the high intensity zone. This strategy makes it possible to considerably increase the sensitivity and specificity of SERS detection. The availability of these cruciform assemblers has been possible thanks to the collaboration with researchers from the Pontificia Universidad Católica de Valparaíso, who have synthesized several of these molecules with different structures including pyridine and thiophene residues in their structure, groups capable of strongly adhering to the metal surface.

Likewise, our group is designing new manufacturing methodologies for plasmonic nanoparticles to be used in the detection of emerging contaminants of the phenoxy type, such as MCPA and 2,4-D, for which a modification of nanoparticles manufactured with citrate greatly improves its applicability.

## **PLASMONIC EFFECTS AND BIOMOLECULE ANALYSIS**

The excitation of plasmons in nanostructured metals, mainly silver and gold, can be used in the study of biomolecules. This type of analysis allows a characterization of biomolecules at physiological concentrations, which allows their characterization at concentrations similar to the biological media where they are found.

The plasmonic effects analyzed were the following: a) localized surface plasmon resonance (LSPR); b) interparticle hybridization of plasmons, manifested through nanoparticle aggregation processes; and c) the intensification of the electric field induced fundamentally in the points of maximum field intensification located in interparticle spaces or gaps, and in tips generated in fabricated nanoparticles bearing an anisotropic morphology. This last effect is responsible for the SERS technique.

These effects present a promising application in the field of biophotonics. During 2022, different metallic substrates have been used to carry out the study of the adsorption of peptides on nanoparticles, particularly oligopeptides used in the manufacture of prostheses, and others of great importance in medicine such as beta amyloids and designer peptides used for the biofunctionalization of surfaces with the aim of designing biological sensors capable of detecting the presence of pathogens.

During the year 2022, a new line of research has been started based on the use of plasmonic nanoparticles for the analysis of complex biological systems. The study of lichens and fungi of different species has begun. The first results are quite promising in the application of the SERS technique in the identification of different types of fungal species. Another application of SERS that has been carried out is the detection of toxicological substances such as bufetamine, as well as the study of polyphenolic molecules existing in plant tissues such as oak galls.

Another interesting application of plasmonic effects has been the detection of biomolecules in biological and archaeological materials without the need for their extraction from the matrix materials, which allows the development of an in situ analysis method that preserves the original materials. This methodology has been applied in the case of the detection of the natural pigment carminic acid, the most important component of the carmine dye, in archaeological textiles from northern Chile. Star-shaped silver nanoparticles have been used on this type of material, since they generate a greater field intensification than nanospheres. The detailed analysis of the carmine dye in wool textile fibers has also revealed the presence of biological material from cochineal insects, from which the carmine red dye is extracted. Specifically, characteristic nitrogen bases existing in the nucleic acids of these insects were detected.

Silver nanostars have also been used to detect carminic acid in challenging biological materials such as bird feathers. This research has been carried out on the feathers of *Regulus calendula*, a species of bird with a crest of red feathers on its head. The use of star-shaped nanoparticles has revealed the presence of carminic acid in its crest feathers, which indicates that the dye is acquired through the diet of this bird based on cochineal insects during its migratory periods in North America. This research has been conducted thanks to a collaboration with researchers from the University of California Los Angeles (UCLA).

## SPECTROSCOPIC TECHNIQUES APPLIED TO THE STUDY OF CULTURAL HERITAGE

The investigation of iron gall inks present in ancient manuscripts has continued during 2022 in order to make a discrimination of the different types of inks used in the same document or similar documents, where different inks used by several people can be analyzed. The main objectives of this work were: a) discrimination of iron gall inks in manuscripts written at the same time through the use of Raman, infrared and XRF spectroscopy; b) identification and assignment of the Raman spectral markers of similar writings and their correspondence with the chemical structure of the components; c) evaluation of the effect of aging on the spectral signals in order to find temporary spectral markers, which can contribute to knowing the approximate age of the writings and the possible subsequent modifications made to the manuscripts over time. This work is being completed with the manufacture of iron gall inks in our laboratory following the recipes found in ancient manuscripts, for later comparison with inks from the historical manuscripts.

During this year, the analysis of the iron and copper complexes with different polyphenolic substances existing in iron gall inks has been deepened, and a theoretical study has been developed based on the analysis of the vibrational modes of different iron complexes of these polyphenols to help in the interpretation of the vibrational spectra of these substances of great importance for Cultural Heritage given their presence in historical manuscripts. The results produced from this research will assist in the analysis of historical manuscripts that is intended to be carried out in the future in the National Library of Madrid and the Library of the Royal Palace of Madrid.

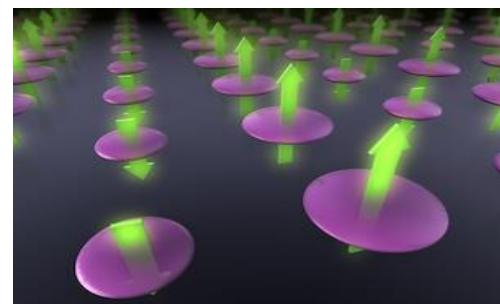
The application of Raman and FTIR spectroscopy in the analysis of materials contained in inks found in Egyptian burial chambers has been another of the tasks that have been developed in our group this year. This type of study implies great difficulty since it has to be carried out in-situ with portable instrumentation capable of being introduced into the burial chamber. Raman spectroscopy has been used in the analysis of the pigments contained in these inks. However, the presence of a high content of organic substances in them has made this application extremely difficult. Nevertheless, the DRIFT (Diffuse Reflectance Infrared Fourier Transform) technique has allowed the in-situ characterization of these inks, although the most intense signals come in this case from the dispersing and binding materials. However, DRIFT spectra have provided important information on the content of materials such as calcite, gypsum, animal glue, waxes and oils. These materials present different signs at different points that have made it possible to differentiate the intervention of different scribes in the studied panels.

In 2022, in the frame of the CSIC Archaeology Hub, the micro-Raman technique was applied to the analysis of soil and painted plasters samples taken from constructions on the Neolithic site of Çatalhöyük. Raman bands of red ochre were observed and also of gypsum, which is not in accordance to the soil manterials employed in the constructions. Besides, we have started the study of glues employed in archaeological tools. A non-destructive analysis was possible by using a micro-FTIR instrument.

## OPTICAL PROPERTIES OF METASURFACES: BOUND STATES IN THE CONTINUUM

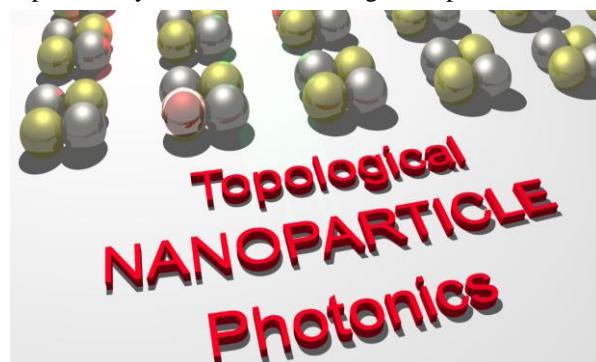
We have continued our ongoing work on planar periodic arrays (metasurfaces) of resonant dielectric and plasmonic subwavelength structures with special emphasis on bound states in the continuum (BICs). BICs have attracted much interest lately in photonics for their (theoretically) infinite Q factor. These states are leaky modes that in a certain limit of some parameter space cannot couple to any radiation channel. In order to trap light in such nearly-zero-linewidth electromagnetic modes, a common approach is to exploit metasurfaces: outgoing specular channels can be suppressed by tuning the parameters of the system in various manners, leading to symmetry-protected BICs. On the basis of a generalized coupled electric/magnetic dipole theory for infinite arrays, a variety of scenarios has been investigated where single/double meta-atoms can be simply described by a combination of various electric and/or magnetic dipoles. Our theoretical work has been developed in collaboration with the Donostia International Physics Center, supported in turn by MICIN Project MELODIA. Furthermore, we have demonstrated that:

- Si nanodisk dimer metasurfaces with dipolar resonances in non-Bravais lattices can support robust, symmetry-protected BICs at telecom wavelength, experimentally confirmed by the groups of Sunshuke Murai (*Kyoto University*) & Jaime Gómez Rivas (*Surface Photonics, Technical University of Eindhoven*).
- Explicit analytical conditions arise in the dipolar regime that allow to predict accidental BIC positions in the parameter space  $(\omega, k_{||})$ . Such conditions are exploited to determine not only single, but also double (for both linear polarizations) accidental BICs occurring at the same position in the dispersion relation  $\omega - k_{||}$  for realistic semiconductor nanodisk meta-atoms. In this connection, we have demonstrated polarization conversion by using all-dielectric metasurfaces with square and rectangular lattices of all-dielectric nano-disks. The precise tuning of the lattice and disks parameters allows to transform linearly polarized light into circularly polarized light with near unity polarization rates, thus yielding right and left circularly polarized light on demand just by varying the angle of incidence.



## TOPOLOGICAL NANOPHOTONICS

Topological nanophotonics is a new avenue for exploring nanoscale systems from visible to THz frequencies with unprecedented control. By embracing their complexity and fully utilizing the properties that make them distinct from electronic systems, we aim to study new topological phenomena. Last year we focused on the current state of the field and highlighted the use of nanoparticle systems for exploring topological phases beyond electronic analogs. We provide several works on the tools needed to capture the radiative, retardative, and long-range properties of these systems. We discuss the application of dielectric and metallic nanoparticles in nonlinear systems and also provide an overview of the newly developed topic of topological insulator nanoparticles. We hope that a comprehensive understanding of topological nanoparticle photonic systems will allow us to exploit them to their full potential and explore new topological phenomena at very reduced dimensions.



## PHYSICAL BEHAVIOR AT NANOSCALES

Within our investigations on the adsorption of molecular hydrogen at cryogenic temperatures in 2022 we have made very significant progress in the experimental study and theoretical analysis of metastable behavior in the adsorption of hydrogen in certain carbonaceous nanostructures. The appearance of metastability in the physisorption of hydrogen in porous materials, that is, of hysteresis in the isothermal adsorption/desorption cycles, is not a common phenomenon and in particular has never been observed in the case of carbonaceous materials. The few reported cases turned out to be caused by some type of chemisorption in the metallic impurities present in the material. From the point of view of its practical application for the storage and management of hydrogen, physisorption is clearly preferable given its low energy barrier to release hydrogen. On the other hand, the hysteresis itself is very interesting from a practical point of view since it would allow both lower working pressures for the same load (high pressure only during fuel loading) and better management of heat flows in the system.

Some time ago we discovered a type of nanostructured material composed mainly of double-layer carbon nanotube bundles that exhibited not only significant hydrogen adsorption but also pronounced hysteresis loops. During 2022, through the use of various analytical techniques (mainly neutron scattering), numerical modeling, and theoretical analysis, we have made great progress in understanding the microscopic mechanisms involved in such a peculiar phenomenon. In particular, we have been able to rule out chemisorption as the origin of metastability for what, to the best of our knowledge, it would be the first known case of hysteresis in hydrogen physisorption in carbonaceous materials.

Within our consolidated collaboration with the group of Dr. Leonor Chico at the Universidad Complutense, we have completed the study of the surprising electronic structure of single-layer carbon nanotubes in their collapsed state. We have previously shown that one class of such systems represent a particularly useful example of what is known as one-dimensional Moire superlattices displaying all the characteristics of their two-dimensional counterpart, the celebrated twisted bilayer graphene (TBG). However, the universality of the behavior remained to be investigated since the studies had been confined to a specific class of nanotubes whose geometric parameters facilitated the calculation of the electronic properties. During 2022 we have been able to successfully calculate the electronic structure of the rest of nanotubes types (two more classes) and demonstrate that the anomalous electronic behavior characteristic of TBGs is universal in collapsed nanotubes.

**PHASE-0 program R3B@GSI-FAIR: O. Tengblad, D. Fernández Ruiz, A. Perea (AEI PID2019-104390GB-I00).**

The commissioning of the R3B experiment, that O. Tengblad as Technical Director of R3B is responsible for, was started in February 2019. This commissioning has continued during the first days of each upcoming beam-time periods in 2020, 2021 and 2022, further a new proposal was approved in 2022 to continue this important activity up to the move of the equipment to the High Energy Cave (HEC) in 2025-26.

During the 2022 campaign at R3B-FAIR the following experiments were carried out;

- S522: Characterization of Short-Range Correlations in exotic nuclei (A.Corsi, O.Hen). The first study of Short Range Correlation (SRC) with a radioactive nucleus ( $^{16}\text{C}$ ) scattering off a proton probe in inverse kinematics. The results will enlighten SRC properties in an asymmetric nucleus, taking advantage of the exclusiveness of the four-fold coincidence measurement with detected pair-recoil nucleon and fragment after SRC pair breakup. Depending on the results, the method can be applied at FAIR to study SRC in even more asymmetric nuclei. Data were taken during the Phase-0 beamtime 16<sup>th</sup> – 24<sup>th</sup> of may
- S509: Study of drip-line phenomena in neutron-rich nuclei: Study of drip line phenomena in neutron-rich nuclei (O.Sorlin, M.Assié). The experiment use deeply-bound nucleon quasi-free knockout to promote 2n and 4n into the continuum. Study of the 2n and 4n decays (direct/sequential) as a function of the binding energy of the knock out nucleon and to study the evolution of r<sub>nn</sub> with binding energy and A. The data will shed light on the role of the reaction mechanism in QFS reactions. Data were taken during the Phase-0 beamtime 31<sup>st</sup> of May – 6<sup>th</sup> of June.

Despite the non-existence of bound two-neutrons systems, pairing interactions play crucial roles in atomic nuclei and in quantum many-body physics in general. In finite nuclei, two-neutron and/or two-proton pairing are responsible for the odd-even staggering observed in the binding energy of atomic masses and for the fact that all even nuclei have a  $J = 0^+$  ground state. More generally, pairing correlations imply a smoothing of the level occupancy around the Fermi energy surface, an enhancement of pair transfer probabilities, as well as a superfluid behavior in nuclear rotation and vibration. In S509 Deeply-bound proton-knockout reactions are used at about 600 MeV/u to investigate two- neutron correlations in the close-to-drip-line or drip-line nuclei  $^{20}\text{C}$ ,  $^{17}\text{B}$ ,  $^{14}\text{Be}$ ,  $^{14}\text{B}$  and  $^{11}\text{Li}$ . These measurements should allow for studying shell evolution far from stability and characterizing neutron pairing interaction as a function of neutron binding energy, nuclear size and shell occupancy. This study will also include the search for narrow resonant states, possibly di-neutron configurations, around the corresponding two-neutrons emission thresholds. This observation would be essential to establish if a generalized Ikeda conjecture, usually applied to  $\alpha$  clusters, can be generalized to two-neutron or even four- neutron systems, and if so, under which conditions. More generally, the experiment will allow to study the spectroscopy of unbound states with an unprecedented energy resolution. The FRS was used to produce and select the nuclei of interest, e.g.  $^{21}\text{N}$ ,  $^{18}\text{C}$ ,  $^{15}\text{B}$  and  $^{12}\text{Be}$ , the NeuLAND detector to detect multi neutron events and, the CALIFA array to detect  $\gamma$ -rays and protons, and the GLAD spectrometer to study the recoil nuclei at its focal plane. See the figure:

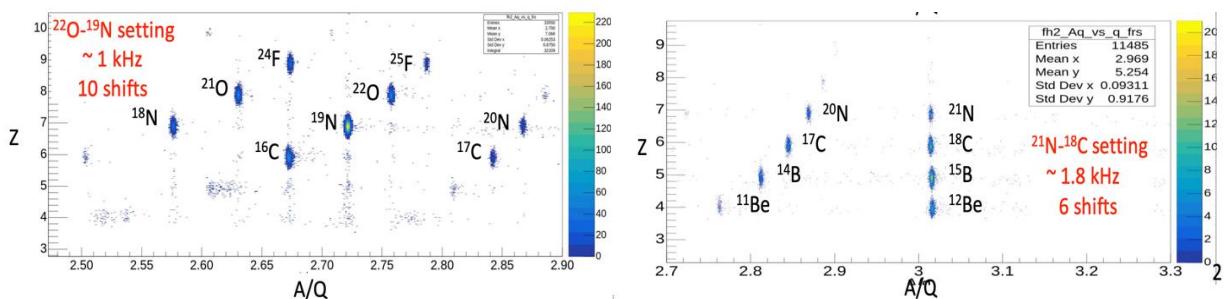


Fig. Z vs A/Q plot for the identification of the nuclei produced in the FRS, with the parameters of the primary beam:  $^{40}\text{Ar}$  @ 600 MeV/u

**WASA@FRS: DeepHyp - Deep learning techniques for the study of exotic hypernuclei (ref: 2019-T1/TIC-13194),  
C. Rappold, S. Escrig López.**

Within the WASA@FRS collaboration, experimental campaign took place successfully in the first trimester of 2022, with the completion of the S447 experiment of hypernuclear spectroscopy and the S490 experiment of eta-prime nuclei at the GSI-FAIR facility, Germany. In 2019, the central part of the WASA detector was transported to GSI-FAIR. In the S447 experiment, the WASA central detector system is combined with the fragment separator (FRS) of GSI. Fragments emitted forward from the hypernuclear decay will be measured by the second-half of the FRS (S2-S4) with an excellent momentum resolution. In the meantime, light particles from the decay of the hypernuclei will be measured by the WASA detectors. The DeepHyp project focused first on the preparation of the S447 experiment, and then now on the data analysis of the obtained experimental data. The development of new analysis techniques based on deep learning techniques aims to improve the hypernuclear spectroscopy. The main objective is to tackle the current hypertriton lifetime puzzle and the confirmation of the nn $\Lambda$  observation. The preparation of the experiment has been a main part for the DeepHyp project plan of 2021. The successful run of the commissioning period happened in January - February 2022, and then data taking of experimental data in March 2022. The finalization of the Geant4 simulations of the realistic experimental apparatus was carried out. More realistic efficiencies of the particle tracking and event reconstruction were estimated. The ion-optics of S2-S4 was optimized for a high fragment acceptance with an expected resolving power of 5200. New deep learning algorithms are in development for the track finding procedure using graph neural networks. We have started the R&D of a new silicon micro vertex detector for precise estimation of the interaction vertex of the nuclear collisions. The data analysis is now on-going with first task directed on the detector calibrations of the full setup, the particle identification has allowed us to observe pions, protons and fragments within the WASA detection system and the FRS S2-S4 high-resolution spectrometer.

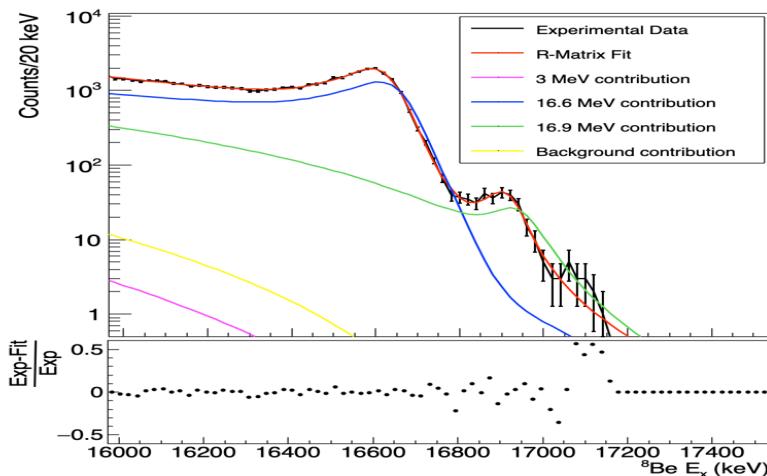
**Hyp@FRS - Machine learning methods applied to the spectroscopy of Hypernuclei: the puzzle of the hypertriton lifetime and of the nnLambda existence studied at WASA@FRS (ref: PID2020-118009GA-I00 ), C. Rappold, S. Escrig López.**

The goal of Hyp@FRS is to study precisely light hypernuclei with ion-induced reactions by employing the fragment separator of GSI and FAIR facilities in Darmstadt, Germany, as a high-resolution forward spectrometer. The objectives of Hyp@FRS is the improvement of spectroscopy through machine learning. With the successful run of S447 experiment, the proposed project aims to validate or discard the discoveries that we published from our first experimental campaign HypHI – Phase 0. The development of innovative methods in machine learning on the hypernuclear spectroscopy experiments is carried out. Convolutional neural networks and long short-term memory architectures will be investigated first for the non-linear modeling of ion optics in the magnetic spectrometer, and secondly in the tracking of measured particles in the experimental apparatus. The WASA@FRS experiment campaign took place over the first trimester of 2022. The data analysis will use the machine learning methods explained above. Additionally, the R&D for the electronic readout of the silicon micro vertex detectors and its construction is carried out by this project. The final goal of the project is to tackle the current hypertriton lifetime puzzle and the confirmation of the observation of the nn $\Lambda$  bound state (a state of two neutrons and a  $\Lambda$  hyperon).

**IS633: Elucidating the structure of the 16.6 - 16.9 MeV doublet of  $^8\text{Be}$  through  $\beta$ -decay feeding: D. Fernández Ruiz, MJG Borge.**

The  $\beta$ -decay of the proton halo nucleus  $^8\text{B}$ . is a good probe to explore the structure of  $^8\text{Be}$ , particular the  $2^+$  isospin doublet formed by two narrow levels at 16.6 and 16.9 MeV, with respectively dominant configurations of  $^7\text{Li}+\text{p}$  and  $^7\text{Be}+\text{n}$ , that has not previously been studied in b-decay. This doublet is the best case of predicted full isospin mixing between nuclear states.

Details of this experiment can be found in our previous reports (2020-21). The decay of  $^8\text{B}$  into the 16.626(3) MeV state has been observed previously, but the (mainly EC) decay into the 16.922(3) MeV state was first hinted at, with only 5 events, in an experiment at JYFL. Being a precision experiment, the analysis has to be performed with great care and thus it is still ongoing; however, from the reconstructed  $\beta$  spectrum we can already confirm that the  $\beta$ -feeding to the 16.6-16.9 MeV doublet is resolved for the first time. Using these high-statistics data, the feeding of the  $2^+$  states in  $^8\text{Be}$  was studied using the R-Matrix formalism. This has allowed for the first time to experimentally verify that the 16.6 and 16.9 MeV states of  $^8\text{Be}$  are completely isospin mixed. Additionally, we were able to determine through a study of the  $\beta$ -recoil spectrum that the decay is dominated by its Gamow-Teller component up to 15 MeV.



**Fig. 1.** Beta feeding spectrum (Black) with the R-Matrix fit (red) and its individual components.

The results obtained so far, were presented to the XIV CPAN reunion (“*Probing the structure of <sup>8</sup>Be through the Beta decay of <sup>8</sup>B: An R-Matrix analysis*”, D.F.Ruiz, Bilbao, 24-Nov-2022) and to the EuNPC conference (“*R-Matrix study of the beta decay of <sup>8</sup>B to the highly excited states of <sup>8</sup>Be*”, D.F.Ruiz, Santiago de Compostela, 27/11/2022).

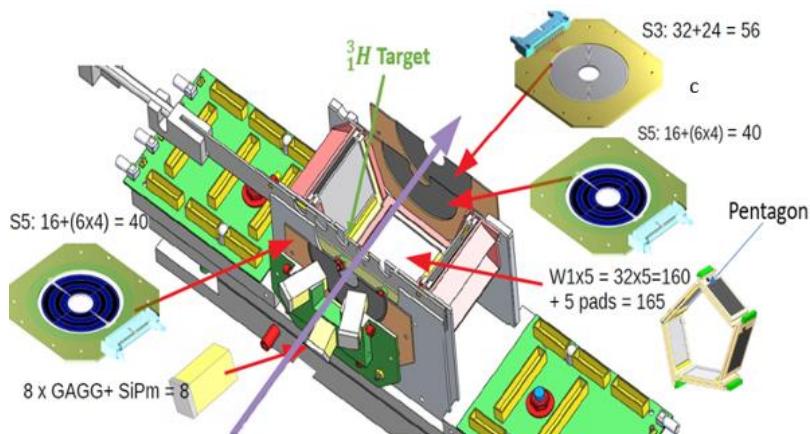
**IS659: Precise measurements of the β-decays of <sup>9</sup>Li and <sup>8</sup>He for reactor neutrino experiments:** *M.J.G. Borge, O. Tengblad, A. Perea, V. Garicvia Tavora, D. Fernandez Ruiz* (AEI PID2019-104390GB-I00)

The decays <sup>9</sup>Li and <sup>8</sup>He produced by cosmic rays represent one of the largest irreducible backgrounds for reactor antineutrino experiments. The correct treatment of such decays is therefore of large importance in developing methods for reducing this cosmogenic background in the calculations. Existing data on the decay schemes of <sup>9</sup>Li and <sup>8</sup>He are insufficient for an adequate treatment of these backgrounds in current and planned reactor antineutrino experiments. This experiment by the MAGISOL collaboration at ISOLDE will provide the missing data by measuring for the first-time coincidences between neutrons and charged particles including β-particles. A very compact system for the detection of charge particles, in combination with the IDS HPGe gamma and the INDIE neutron arrays was designed by A. Perea and constructed at IEM. The experiment was mounted and took radioactive <sup>8</sup>He beam in the period of 25<sup>th</sup> of April until 25<sup>th</sup> of May. The data is under analysis.

**IS690: Reaction studies with neutron-rich light nuclei at the upgraded SEC Device: Testing the parity inversion in <sup>11</sup>Li:** *D. Fernández Ruiz, O. Tengblad, M.J.G. Borge, A. Perea* (AEI PID2019-104390GB-I00).

A halo nucleus was coined to describe a group of nuclei with an unusually large spatial extension, diverging from the standard  $r = roA^{1/3}$ . The first empirical observation of this behaviour came from scattering experiments of Lithium isotopes, intended to measure the interaction cross-section of neutron-rich nuclei. As we move from the line of stability, the cross-section drastically increases, pointing toward a nuclear radius larger than the theoretical prediction. This discovery was interpreted as a new type of nuclear system, formed by a compact core plus an external halo. The <sup>11</sup>Li isotope is the archetype of a two-neutron halo: a three-body borromean system formed by two weakly correlated neutrons linked to a <sup>9</sup>Li core. While the g.s structure of <sup>11</sup>Li is known to be a mixture of p(59(1)%)+s(35(4%))+d(6(4)%), knowledge of higher energy levels of is still lacking. The experiment, will be carried out at the HIE-ISOLDE facility in 2023. During 2022 the work has been concentrated on optimizing the setup via Geant4 simulations.

Identifying the influence of background reactions (especially the <sup>9</sup>Li(p,d)<sup>10</sup>Li and elastic channels, is crucial in these experiment, therefore we need a setup that can differentiate between very similar reaction products and offer an optimal angular coverage. Our upgraded detection set-up at SEC (Scattering Experimental Chamber) will consist of three detector structures: a) the SAND detector for neutron detection, b) 8x GAGG scintillators for gamma detection, c) an array of charged particle detectors. The experiment foresees a <sup>9</sup>Li beam accelerated up to 7 MeV/u and let to impinge on a titanium foil with <sup>3</sup>H implanted. The charged particle detector set up is composed by the following parts a) 5 particle telescopes formed by a double-sided silicon strip detectors (DSSD) and a thicker silicon detector (PAD) surrounding the target, forming a pentagon that covers most directions tangent to the beamline. b) 2 Silicon Circular Detectors (CD) (S3+S5) form a telescope covering the forward direction. C) An additional circular detector (S5) covers the backwards direction.



*Fig: Assembly of detectors for charged particles*

**IS698:  $^{112}\text{Sn}+^4\text{He}$  HIE-ISOLDE SEC:  $\alpha$ -scattering on unstable proton-rich tin isotopes in inverse kinematics for the astrophysical p-process: O. Tengblad, A. Perea, V. García Távora, D. Fernández Ruiz (AEI PID2019-104390GB-I00).**

The poor knowledge of the  $\alpha$ -nuclear potential in unstable nuclei still dominates the uncertainties associated to the production of the heavy p-nuclei. Calculations of the elastic scattering cross section at energies close to the Coulomb barrier based on global  $\alpha$ -nucleus potentials differ up to a factor of 2 when moving towards unstable nuclei with higher proton-to-neutron ratios. This experiment study for the first time complete angular distributions of the elastic  $\alpha$  scattering process on exotic Sn-nuclei at energies around the Coulomb barrier, close to the energy region of astrophysical interest, by profiting from newly developed solid state  $^4\text{He}$  targets (US Sevilla), the high-intensity tin beams available at HIE-ISOLDE, and a versatile detector setup at the SEC chamber.

The experiment was led by the group of Dr. D. Galaviz of LIP Lisbon. The IEM group was responsible for the experimental setup and of the data acquisition used during the experiment at HIE-ISOLDE. The experiment was prepared and got radioactive beam in the period from 19<sup>th</sup> of august until 29<sup>th</sup> so September, very good data was obtained that is under analysis.

**CMAM: Experiments to study nuclear reactions of light nuclei with astrophysical interes:  $\alpha$ -clustering in light nuclei V.G. Távora<sup>l</sup>, D. Fernández, A.N. Neria, A. Perea<sup>l</sup>, M.J.G. Borge<sup>l</sup>, O. Tengblad<sup>l</sup>.**

- Populating  $\alpha$ -unbound states in  $^{16}\text{O}$  via  $^{19}\text{F}(\text{p}, \alpha\gamma)^{16}\text{O}$  reaction

$^{12}\text{C}(\alpha, \gamma)^{16}\text{O}$  reaction has great importance in Nuclear Astrophysics, due to its relevance in both determining the ratio of carbon transformed into oxygen and in the synthesis of elements heavier than  $A = 16$ . During the last 60 years, there have been many advances in its study, however, the uncertainty in the total cross section remains undesirably large. The cross section of this reaction is determined mainly by the resonance tails and direct captures to the ground and excited states of  $^{16}\text{O}$ , since there is no natural parity state that serves as a resonance for direct radiative capture of  $^{12}\text{C}(\alpha, \gamma)^{16}\text{O}$ . As an alternative to shed light on this cross section, we used the  $^{19}\text{F}(\text{p}, \alpha\gamma)^{16}\text{O}$  reaction to populate excited states of  $^{16}\text{O}$  emitting  $\alpha$  and determine their  $\alpha$ -widths.

A preliminary assignment of the  $\alpha$  particles emitted and the  $^{16}\text{O}$  level involved has been done, as well as a study of the events in coincidence between the different detectors of the experimental set-up.

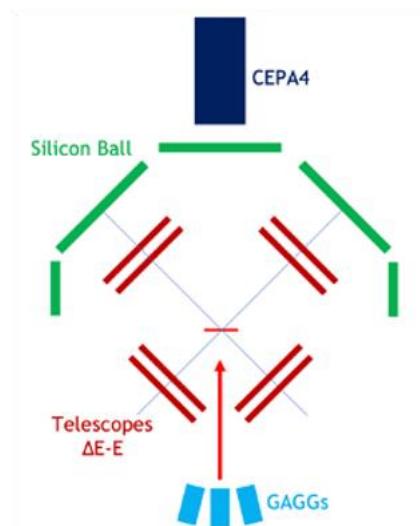


Fig. 1. Esquema del montaje experimental

To study this reaction, we used a 2.6 MeV proton beam in the laboratory frame, that impacts on a  $\text{CaF}_2$  target located inside the vacuum chamber of the Nuclear Physics line at CMAM. Our total measure time was: 32.20 h. The detection system consists of 14  $5 \times 5 \text{ cm}^2$  pixelated silicon detectors that cover angles from  $27^\circ$  to  $87^\circ$ , 4 telescopes ( $\Delta E$ - $E$ ) consisting of a multi-segmented DSSD silicon detector ( $\Delta E$ ) and a PAD ( $E$ ), each with a surface of  $5 \times 5 \text{ cm}^2$ . For gamma radiation detection we used 8 GAGG scintillator detectors and the CEPA4 detector (phoswich scintillator). See Fig. 1.

The data obtained are currently under analysis. Figure 2 shows the excited states of  $^{16}\text{O}$  and the possible states involved in the reaction. Fig. 3 shows the spectrum obtained and the spectra resulting after applying different coincidence conditions.

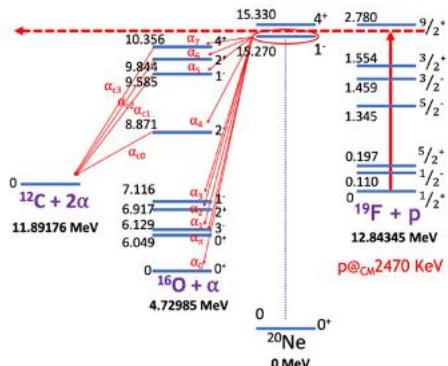


Fig. 2. Esquema de niveles de la reacción.

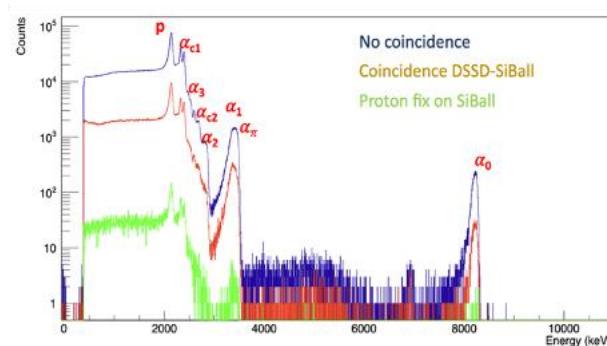


Fig. 3. Estudio de coincidencias e identificación  $\alpha$ .

The preliminary results obtained were presented at EUNPC (European Nuclear Physics Conference) on October 24<sup>th</sup>-28<sup>th</sup>.

- Study of the primordial abundance of  $^9\text{Be}$  via the  $^7\text{Li}(^3\text{He}, \text{p})^9\text{Be}$  reaction

The situation regarding the abundance of primordial  $^7\text{Li}$  is far from clear, and a check of SM's predictions for primordial abundances is necessary. For a long time, it has been thought that  $^9\text{Be}$  was produced in small amounts in the Big Bang nucleosynthesis. However, recent network calculations indicate that  $^7\text{Li}(^3\text{H}, \text{n})^9\text{Be}$  reaction increases the abundance of  $^9\text{Be}$  by several orders of magnitude compared to previous considerations. The cross section of the  $^7\text{Li}(^3\text{H}, \text{n})^9\text{Be}$  reaction can be inferred from data from similar reactions, such as the  $^7\text{Li}(^3\text{He}, \text{p})^9\text{Be}$  reaction, which cross section can be easily measured. In addition, this study provides a complementary information to the ISOLDE (CERN) experiment IS659 on the beta decay of  $^9\text{Li}$  and will facilitate the analysis of this decay. Using the same experimental setup as for the  $^{19}\text{F}(\text{p}, \alpha\gamma)^{16}\text{O}$  experiment, an experiment was performed to study  $^7\text{Li}(^3\text{He}, \text{p})^9\text{Be}$  reaction. In both experiments, a new data acquisition system has been implemented that uses new digitizers, greatly reducing the associated electronics and simplifying the logic of the signals. It also allows measurements with high counting rates (tens of kHz) and low dead time. The introduction of the new DAQ has required the development of new unpacking and data analysis software, which is currently undergoing testing. The silicon telescopes make it possible to identify the particles emitted in the two possible reaction channels:  $^7\text{Li}(^3\text{He}, \text{p})^9\text{Be}$  and  $^7\text{Li}(^3\text{He}, \text{d})^8\text{Be} \rightarrow 2\alpha$ . The data obtained in this experiment are currently under analysis.

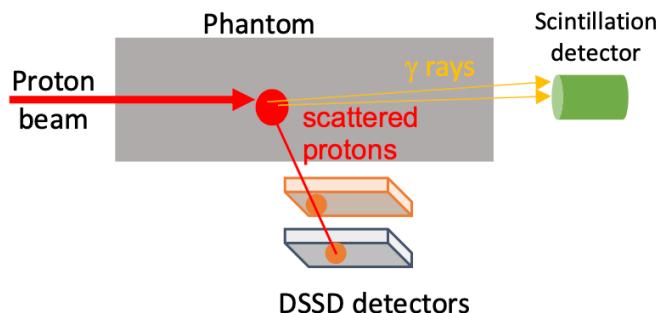
**PRONTO-CM (B2017/BMD-3888 Comunidad de Madrid. J.A. Briz, M.J.G. Borge, O. Tengblad, V. García, A. Perea, A. Nerio.**

As we have discussed in the previous memoria (2021), the arrival of the proton therapy technique to Spain in 2020 (at Quirónsalud and Clínica Universitaria de Navarra) and the new centers approved motivates new research activities. The objective of our activities is to design a prototype of proton scanner using the proton Computerized Tomography technique (proton CT). The use of this technique would allow to increase the accuracy of proton therapy treatment plans and a better control of the doses applied by reducing the uncertainties in the range of protons with respect to images obtained using conventional CT with X-rays.

In June and December 2022, we have continued our experiments at the Cyclotron Centre Bronowice (CCB) in Krakow (Poland). We have used an upgraded data acquisition system in order to manage much higher countrates (40kHz with < 5% deadtime). As before radiographs of several samples with spatial patterns built in aluminium inserted in a matrix of polymethyl methacrylate (PMMA), were used. Further, this experiment relevant aspects such as the determination of Relative Stopping Powers (RSP) of different materials and the influence of Multiple Coulomb Scattering on the reconstructed images were assessed in a further step towards a final implementation at clinical level.

An accurate and precise proton therapy treatment plan to be successful requires a verification that the dose received corresponds to the one calculated in the treatment plan. For this purpose, several techniques are under study both using direct or indirect methods. We explore here some indirect methods using prompt gamma rays, scattered protons and secondary neutrons.

- Prompt gamma rays: based on the idea of measuring secondary prompt gamma rays using a scintillation detector placed Proton downstream the phantom. For a longer range of the protons a higher counting rate of gamma rays in the beam detectors would be obtained.
- Scattered protons: using our tracking detectors to determine the longitudinal distribution of scattered protons and correlate it with the Bragg peak position.
- Secondary neutrons: using a neutron- proton converter and the tracking detectors to determine the longitudinal distribution of the produced neutrons by the passage of the protons in the phantom.



*Fig. Setup for the proton range verification measurements. Proton beam in this case would be ideally pencil beam arriving from the right side. By using the 2 DSSD detectors one can deduce the origin point where the proton was scattered, or the neutron was produced if a n-p converter is placed in between the phantom and the DSSD detectors. The LaBr<sub>3</sub> detector placed downstream the phantom will be used to deduce the proton ranges using the secondary gamma-rays produced.*

#### **Study of single-particles states in fp-shell nuclei through $^{50}\text{Ca}(\text{d}, \text{p})^{51}\text{Ca}$ transfer reaction @RIBF-RIKEN (PID2020-118265GB-C41, (Ferrera González, Andrea Jungclaus)**

Motivated by the discovery and subsequent discussion in recent years about new shell closures in neutron-rich nuclei with neutron numbers N = 32 and 34, which are pivotal to explore the evolution of the fp-shell orbitals far from the valley of stability, in December of 2022 the SHARAQ12 experiment (spokespersons K. Wimmer and D. Suzuki) was performed at RIKEN research center (Japan) aiming to study the single-particle structure of  $^{51}\text{Ca}$  via the (d, p) transfer reaction using an energy-degraded secondary  $^{50}\text{Ca}$  beam. The beam was produced at the BigRIPS separator and then conducted to the OEDO beamline, where it was degraded in energy to 15 MeV/nucleon with the purpose of inducing (d,p) transfer reactions on a CD<sub>2</sub> target, particle identification of the beam based on the ToF-Bp method showed excellent isotope separation. The recoiling protons scattered in the reaction were measured with the detector setup TINA2, consisting of a box of four TTT double-sided silicon strip detectors backed by CsI crystals and a backward annular YY1-type silicon strip detector array with CsI crystals behind. Heavy  $^{51}\text{Ca}$  ejectiles were measured by the QGD spectrometer equipped with a set of Strip-Readout PPAC detectors and an ionization chamber for background suppression via charge identification. Preliminary before-experiment Geant4 simulations, and the participation in the preparation and execution of this experiment became a part of the PhD thesis project of Carlos Ferrera, the analysis of excitation energies and angular distributions is ongoing.

**Espectroscopía gamma de alta resolución del  $^{136}\text{Te}$  dentro del proyecto HiCARI @RIBF-RIKEN (PID2020-118265GB-C41), estudiante de doctorado, Jaime Acosta; Andrea Jungclaus.**

An in-flight gamma-ray spectroscopy experiment to study the Coulomb excitation of  $^{136}\text{Te}$  on a gold target at relativistic energies was carried out at the RIBF RIKEN (Japan), in 2015 and was reported on in previous reports 2020-2021. The surprising result of this experiment, suggested the existence of a highly collective excited state at an energy around 4 MeV. Unfortunately, the limited energy resolution of the gamma-ray spectrometer used made it impossible to accurately determine the energy and the decay pattern of this intriguing new state.

In the fall of 2020, a follow-up experiment (NP1912-RIBF193) was carried out at RIBF, this time using a gamma-ray spectrometer consisting of high-resolution germanium detectors (HiCARI), which allows us to determine the properties of the high-lying excited state in  $^{136}\text{Te}$  with much better precision. In addition to the inelastic excitation on the gold target, a beryllium target was used. By comparing the reaction cross sections measured on heavy and light reaction targets, information about the spin of the state can be obtained.

In 2021, the analysis of the data taken were taken as part of the PhD thesis project of Jaime Acosta. Although the analysis of the data is still ongoing, some progress has been made including the production of clean particle identification plots, calibrating the different detectors and setting up and testing realistic Montecarlo simulations. Preliminary Doppler-corrected gamma spectra have been obtained, eg. see figure. The next step consists in refining the current analysis in order to find the expected new excited state of  $^{136}\text{Te}$  and comparing the results with those obtained from the simulation.

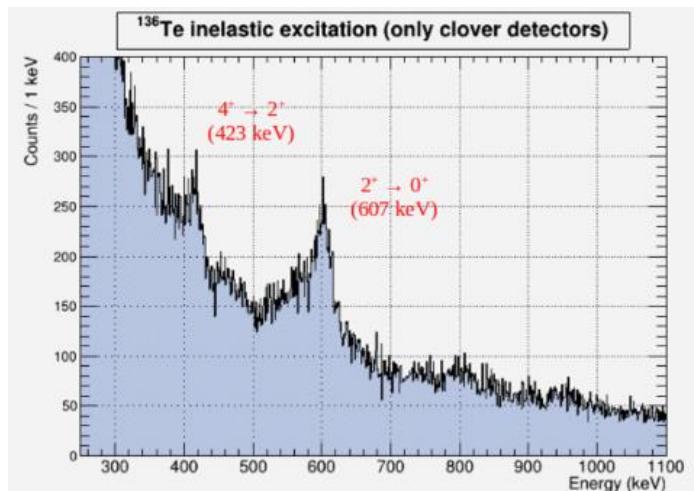


Fig. Doppler corrected gamma spectrum from  $^{136}\text{Te}$

## 2B.3. MOLECULAR PHYSICS DEPARTMENT

### RESEARCH LINES:

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

### RESEARCH SUBLINES:

- Astrophysical ices.
- Spectroscopic characterization of cold plasmas of astrophysical relevance.
- Generation, processing and study of interstellar dust analogs.
- Raman Spectroscopy in supersonic gas jets.
- Energy transfer by inelastic molecular collisions.
- Spectroscopic parameters of molecules of relevance in collisional, atmospheric and combustion processes.
- Atomistic modelling and experimental characterization of secondary uranium oxide phases produced in conditions of storage of spent nuclear fuel.
- Quantum Control of Alignment and Orientation in Isolated Molecules and Ultracold Dipolar Gases.

### EMPLOYED TECHNIQUES:

- IR spectroscopy and mass spectrometry applied to low temperature, low pressure systems.
- Computacional methods: Gaussian, SIESTA, CASTEP, CRYSTAL, CP2K, Suite Materials Studio.
- Plasma generation os cold complex plasmas in low pressure RF gas discharges.
- Mass spectrometry of neutrals and ions. Langmuir probes.
- Visible and near UV emission spectroscopy. Polarimetry.
- Langmuir probes for electron energy and charge density measurements.
- Linear and non-Linear (Stimulated) Raman Spectroscopy.
- Supersonic gas jets.
- Raman-Raman double resonance spectroscopy.
- Difference frequency laser spectroscopy.

### RESEARCH ACTIVITY:

#### MOLECULAR FLUID DYNAMICS

After the instrumental improvements of the previous year, during 2022 we have continued the study of out-of-equilibrium CO<sub>2</sub> flows, and we have started a new line of research on microfluidics and another one on the spectroscopic characterization of atmospheric pollutants, within the framework of the ongoing projects. All these studies are based on experiments in sub- and supersonic gas jets, probed by means of quantitative Raman spectroscopy. Supersonic gas jets are an extraordinarily fertile medium in fluid dynamics, where the study of inelastic intermolecular collisions, which are the fundamental mechanism of energy transfer in gases, is feasible. The laboratory of Molecular Fluid Dynamics is equipped with two complete instruments for gas- and liquid-jet diagnostics by Raman spectroscopy, these instruments have been developed over the last twenty-five years, and their performance and flexibility are unique worldwide.

The vibrational relaxation of CO<sub>2</sub> is a very important process in the radiative balance within Earth's atmosphere, as well as those of Venus and Mars, where the gas is usually under non local thermodynamic equilibrium (nLTE). However, experimental data are lacking for many important internal relaxation processes. We have carried out new experiments on jets of CO<sub>2</sub> at 200 and 500 C diluted to 10% in Ar, as well as static CO<sub>2</sub> at 100 C to try to determine with more accuracy the intrinsic intensities (polarizability transition moments) of the Raman vibrational bands. The Raman intensities allow us to measure the molecular number density and the individual populations of the rotational and vibrational energy levels. From these measured quantities, the corresponding rotational and vibrational temperatures can be retrieved at each point, illustrating the breakdown of equilibrium between these internal motions. Finally, from their time evolution along the jets, we have determined several quantities of the flow, such as relaxation times, increment of entropy, non-equilibrium heat capacity, bulk viscosity, and transfer rate coefficients between internal levels due to the inelastic collisions. The global

analysis of the experiments carried out so far, has allowed us to obtain a set of self-consistent rotational rate coefficients along the thermal range from 50 to 600 K.

In the new research line devoted to microfluidics, we have carried out experiments to test the capability of Raman spectroscopy in the diagnosis of gas flows in small channels. To that goal, we designed and 3D printed a cell with a millimetric internal channel, which we then used to conduct mass-controlled flows of N<sub>2</sub> and CO<sub>2</sub> through it. Despite the severe spatial limitations, we were able to record rotational and vibrational Raman spectra of these gases, even under quasi-rarefied flow conditions, and to measure the small thermal gradient along the channel. This work is a collaboration with the group of Prof. S. Colin of the Université Paul Sabatier of Toulouse (France).

Finally, we have recorded new Raman spectra of acetone CH<sub>3</sub>COCH<sub>3</sub>, CD<sub>3</sub>COCD<sub>3</sub> and diacetyl CH<sub>3</sub>COCOH<sub>3</sub>. They were both obtained under static conditions as well as in expansion diluted with noble gases. These molecules are involved in the degradation cycles in the atmosphere of various volatile organic compounds (VOCs). It is expected that the analysis of the spectra obtained will allow a better characterization of the intramolecular dynamics, and the remote detection of these species. This work is carried out in collaboration with the Department of Theoretical Chemistry and Physics of the IEM (M.L. Senent) and with the Université Mohamed V of Rabat (Morocco), within the framework of the European project ATMOS.

## MOLECULAR PHYSICS OF ASTROPHYSICAL SYSTEMS AND PLASMAS

### Astrophysical ices.

Motivated by the recent detection of urea in the interstellar medium, a study on the stability of this species under vacuum-ultraviolet (VUV; 6.3–10.9 eV) irradiation and high-energy (5 keV) electron bombardment at 30, 100, and 200 K has been published. Radiation yields for urea destruction were comparatively small both for photolysis and radiolysis. Electron bombardment was found to be somewhat more efficient than VUV photolysis for the destruction of urea molecules. The stability of urea and urea/water ices increases with growing temperature pointing to the presence of efficient repair mechanisms, either due to energy dissipation or urea reformation, that are enhanced with increasing mobility.

The binding energy distribution of acetaldehyde on amorphous water ice has been obtained, both experimentally and theoretically. The experiments were carried out in the ultra-high vacuum chamber available in the ice at IEM, and the theoretical calculations at the U. Stuttgart. Acetaldehyde is a species that has been found in the gas phase in dense clouds gas in interstellar medium and the information provided, published in the journal *Astronomy&Astrophysics*, is necessary for modeling the chemistry in these environments.

Laboratory experiments on diffusion and sublimation of methane through ice dust layers to mimic cometary nucleus activity have been performed, to simulate comets activity in its orbit around the Sun. This desorption of volatiles from comets provides most valuable information on comets interiors. Ice mixtures containing 1 % of methane with different morphologies were generated and several warming-heating ramps were performed at different heating rates. To simulate dust an indene layer was grown, a species which sublimation temperature is higher than that of water. This study was the Master thesis project of Carla Tamai, that was defended at the TU Delft (Netherlands).

The indene molecule (C<sub>9</sub>H<sub>8</sub>) has been detected in the interstellar medium in dense clouds at temperatures of 10 K. For its solid phase detection in the grains present in those regions it is necessary to know its IR spectrum at low temperatures. Infrared spectra of indene and indene/water ices generated at 10 K and 160 K, were recorded. Its stability against VUV radiation and Cosmic Rays has also been studied.

### Generation, Characterization and processing of interstellar dust analogs.

We have pursued the collaboration with the ICMM-CSIC, using the Stardust facility, for the study of nanoparticles generated under conditions analogous to those in the atmospheres of evolved stars. Two magnetrons with Si and C targets were used in atmospheres with different H<sub>2</sub> concentrations. Optical spectroscopy measurements have been crucial to understand molecular formation in the vicinity of the discharge. At present, these data are analyzed, together with data from surface analysis techniques applied to the formed deposits, and are modeled for the interpretation of the results.

As a part of an i-Link project (see section on projects below) we have established a cooperation with the group of Dr Ionut Topala from the Iasi Plasma Advanced Research Center (IPARC), Romania, for the study of carbonaceous deposits generated with different sorts of plasmas in our respective laboratories. The deposits have been processed with high energy ions (1 MeV) in a tandemron accelerator in Bucharest, and with 5 keV electrons in our laboratory. The results are being analyzed and further experiments are planned.

The joint experimental and modeling study on the time evolution of neutral and ionic species in modulated C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>+Ar RF discharges has been completed. Discharge conditions were selected to observe the first stages of polymerization, before the onset of formation of carbonaceous nanoparticles. The results have been published in *Plasma Sources Sci. Tech.*

Experiments on the polarization of light scattered from carbonaceous interstellar dust analogs generated in our reactors are carried out at present in collaboration with the IAA-CSIC. The results will be compared with astronomical observations from various environments.

A review article on the progress in the knowledge of the structure and evolution of interstellar carbonaceous dust has been published. In this work, the relevance of laboratory work as a necessary complement of astronomical observations is stressed.

### **Dynamics of elementary chemical reactions.**

In collaboration with the Department of Physical Chemistry of the Universidad Complutense (Unidad Asociada CSIC) we have continued theoretical studies on the reactivity of the F+HD system at very low (< 1 meV) collision energies, in the region of orbiting resonances.

### **Atomistic modeling and experimental characterization of mineral phases: clays, silicates, oxalates, ices of astrophysical interest and food additives.**

Computational modeling, the structures and infrared spectra of urea ice have been performed theoretically, as well as the calculation of the elastic properties of metal-organic materials, specifically zinc imidazole ZIF-75, which surprisingly and unexpectedly showed negative linear compressibility. Results that were published in Applied Science.

The structures of food additives such as some salts, in our case monosodium glutamate and a sugar such as xylitol began to be studied theoretically. Works whose preliminary results were presented at the National Spectroscopy Meeting during the month of July in Malaga.

### **Infrared spectroscopy of molecular ions of astrophysical relevance.**

The implementation of a magnetic field in the hollow cathode reactor where molecular ions are formed has been completed. The longitudinal magnetic field is induced by solenoid coils coaxially surrounding the reactor. Preliminary results show that the attained sensitivity is similar to that obtained with the discharge current modulation, but with a better selectivity to tell apart signals coming from the ions from those of other neutral species. In a collaboration with Drs. O. Asvany, D. Gupta y W. Silva, from the I. Physikalische Institut (Universität zu Köln) we have recorded vibration-rotation and pure rotation spectra of several isotopologues and isotopomers of  $C_3H_3^+$ , with the newly developed technique of "Leak Out Spectroscopy" in ion traps. In collaboration with Dr. S. Thorwirth y M. Bast, also from Köln, we have obtained vibration spectra of the ions  $CH_3CO^+$  and  $CH_3CS^+$  using the infrared photodissociation of Ne-tagged ions and the FELIX (Free Electrons Laser for Infrared Experiments) facility in Nijmegen.

## **LASER SPECTROSCOPY**

### **Spectroscopic parameters of molecules of relevance in collisional, atmospheric and combustion processes.**

The activity developed in the Laser Spectroscopy Laboratory during the year 2022 is part of the research line already started in 2020, which has as a common thread the study of pressure broadening of spectral lines in collisional systems in which the molecule of carbon monoxide, CO, is present either as the main active molecule or as a collider. Throughout 2022, measurements have been carried out in three of these collisional systems:

- N<sub>2</sub>-CO (rovibrational spectrum).
- CO-H<sub>2</sub> (pure rotational spectrum).
- CO-H<sub>2</sub> (rovibrational spectrum).

In this naming convention the first molecule of the pair is the "active" species, whose spectrum is recorded to study the variations in the shapes and widths of the spectral lines, and the second molecule is the colliding species. In the first of the above cases the active species is molecular nitrogen N<sub>2</sub> and the colliding species is CO, while in the other two cases it is the CO molecule that is the active species and hydrogen H<sub>2</sub> the colliding species. The N<sub>2</sub>-CO collisional system is relevant in combustion systems (flames, burners, rockets...), while the CO-H<sub>2</sub> system, whether studied by rotational or vibrational spectroscopy, is of interest due to its presence in astrophysical media such as interstellar clouds. In all cases the technique used for the laboratory study of these line shapes has been Stimulated Raman Spectroscopy, whose main feature is the very high resolution it is able to provide.

The bulk of the measurements in the N<sub>2</sub>-CO system had already been carried out during 2021. During 2022 our collaborator Prof. F. Thibault (University of Rennes) has carried out quantum (based on the close coupling CC method) and semiempirical (based on the infinite order sudden (IOS) and energy-corrected sudden (ECS) approaches) calculations. We have also

repeated some of the measurements for which experiment/calculation discrepancies were observed. After this, a manuscript describing both the experimental and theoretical results was prepared and has been submitted to the Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer. It should be noted that this is the first experimental measurement of collisional broadenings for the N<sub>2</sub>-CO collisional system.

The second system on which measurements have been carried out is the CO-H<sub>2</sub> pair, in this case to study the effect of collisions on the shape and width of the lines of the CO **pure rotational** spectrum. This objective has been an experimental challenge in itself given the difficulty of applying the SRS technique to spectra of such low frequencies as those of the pure rotation of the CO molecule, to the extent that after a first demonstration several decades ago by the creators of the SRS technique this type of measurement had never been carried out again. Therefore, in a first stage, important modifications have been introduced in our SRS experiment that have included both changes to the laser sources used, to their mixing scheme to jointly excite the sample and finally to their separation and filtering. This expansion of our experimental capabilities, which has required several months of work, is a considerable milestone in itself and has provided us with the ability to record Raman spectra at frequencies as low as ~11 cm<sup>-1</sup> with resolutions of 0.002 cm<sup>-1</sup>. Having achieved this goal, the experimental technique has been applied to the study of broadenings in the pure rotational Raman spectra (S-branch, ΔJ=+2, between J=0 and J=20) of CO perturbed by H<sub>2</sub> by preparing mixtures and performing systematic measurements at multiple pressures and three temperatures (77, 180 and 298 K). As main result, sets of broadening coefficients for the rotational lines of the Raman spectra of CO perturbed by collisions with H<sub>2</sub> have been obtained, as well as exponents modeling their temperature dependence. Given the relevance of the expansion of our experimental capabilities in the framework of high-resolution Raman spectroscopy, a manuscript describing this experimental expansion and the initial results obtained has been prepared and submitted for publication in the Journal of Raman Spectroscopy.

The third molecular system on which measurements have been carried out is again the CO-H<sub>2</sub> pair, but in this case to study the effect of collisions on the shape and width of the lines in its **rovibrational** spectrum. It is important to note that the study of this system in rotation-vibration presents a special interest precisely because of the possibility it offers us to conduct a comparison with the pure rotational study that we have carried out on this same collisional system: while the broadenings measured in a rovibrational Q branch account only for the effect of inelastic collisions (isotropic broadening coefficients) the broadenings in pure rotational lines also include the effect of elastic collisions without change of state (anisotropic coefficients). The comparison of both types of results will therefore allow us to evaluate the relative "weight" of elastic versus inelastic collisions in the collisional system consisting of CO and H<sub>2</sub> molecules. For this purpose, CO-H<sub>2</sub> mixtures have been prepared again and systematic measurements have been performed on the Raman spectra, in particular the Q branch of the fundamental vibration ( $v=0 \rightarrow v=1$ , ΔJ=0), for lines between J=0 and J=20 at several different pressures (at least five) and three temperatures (77, 195 and 298 K). The measurements have been successfully completed and the analysis of the spectra has allowed us to obtain a set of broadening coefficients for the rovibrational lines of this Q branch, as well as the exponents that adjust their dependence on temperature. In order to perform a comparative analysis of these results, both with the pure rotational ones and with those obtained by simulation for both types of spectra, Professor Thibault has already started quantum calculations (QC) on these same systems. Since the experimental work is essentially completed and we are only waiting for the results of the calculations, it is expected that these will be finalized and a joint paper can be published in the first half of 2023.

**2B.4. MACROMOLECULAR PHYSICS DEPARTMENT****RESEARCH LINES:**

- Multiscale simulation of polymeric materials and biological macromolecules.
- Physical properties and nanostructure of polymers, blends and polymer-based nanocomposites.
- 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:**

- 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.
- Structure development and properties of natural polymers and nanocomposites.
- Organic electronics.
- Virucidal Surfaces

**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 (DSC).
- Incoherent quasielastic neutron scattering (IQNS).
- Optical microscopy. Scanning electronic microscopy (SEM).
- Transmission Electron Microscopy (TEM).
- Atomic force microscopy (AFM).
- Raman Spectroscopy.
- Neutron Scattering.
- Broad band dielectric spectroscopy.
- Shear rheometry in continuous dynamic torsion, capillary extrusion and elongational rheometry.
- Microrheology.
- Dynamic mechanical analysis under flexural and tensile deformations: elastic modulus.
- Size exclusion chromatography (SEC) and tetradetection, and dynamic light scattering (DLS).
- Nanoimprint lithography (NIL).
- X Photon Correlation Spectroscopy (XPCS).
- Scanning transmission X-ray spectro-microscopy (STXM).
- Near Edge X-ray Absorption Fine Structure (NEXAFS)
- Resonant Soft X-ray Scattering (RSoXS) Theoretical and mathematical physics.
- Deposition of polymers by Ink-jet.

## RESEARCH ACTIVITY:

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

#### ESTRUCTURE AND PROPERTIES RELATIONSHIP OF CONDUCTIVE POLYMERS

##### *Poly(3,4-ethylenedioxythiophene):polystyrene sulfonate (PEDOT:PSS) and high-boiling-point additives*

We reported on the interaction between poly(3,4-ethylenedioxythiophene):polystyrene sulfonate (PEDOT:PSS) and high-boiling-point additives in PEDOT:PSS aqueous dispersions and in the final polymer films with the aim of establishing correlations between the structure of both inks and solid thin films. By Small-Angle X-ray Scattering (SAXS) using synchrotron radiation, it was found that the structural changes of dispersions of PEDOT:PSS with high-boiling-point additives can be explained as a two-step mechanism depending on the additive concentration. A compaction of PEDOT:PSS grains was observed at low concentrations while a swelling of the grains together with a phase segregation between PEDOT and PSS segments was evidenced at larger concentrations. Thin films' morphology and structure were investigated by atomic force microscopy (AFM) and synchrotron Grazing Incidence Wide-Angle X-ray Scattering (GIWAXS) respectively. Our two-step model provides an explanation for the small and sharp domains of PEDOT:PSS thin films observed for low-additive concentrations (first step) and larger domains and roughness found for higher additive concentrations (second step). A reduction of the ratio of PSS in PEDOT:PSS thin films upon the presence of additives was also observed. This can be related to a thinning of the PSS shells of PEDOT:PSS grains in the dispersion. The results discussed in this work provide the basis for a controlled tuning of PEDOT:PSS thin films structure and the subsequent electrical properties.

##### *PEDOT:PSS/PEO blends*

Thin films of polymeric blends composed of poly(3,4-ethylenedioxythiophene) polystyrene sulfonate (PEDOT:PSS) and polyethylene oxide (PEO) were investigated by varying the concentration of the two components over the entire range of compositions and the molecular weight of PEO. Phase separation and crystallization have been studied at different length scales by combining Atomic Force Microscopy (AFM) and Grazing Incidence Wide Angle X-ray Scattering (GIWAXS) using synchrotron light. Several different arrangements in the thin films of the two polymers constituting the blend were observed and discussed in detail, providing information about their reciprocal influence at the micro- and nano-scale. In addition to that, we were able to estimate quantitative nanomechanical and nanoelectrical properties via AFM and finally revealing the dependence of the thin films' physical properties on their composition and structure. By varying the blend composition, we achieved different coating capability, mechanical properties, and electrical conductivity. Furthermore, depending on the PEO molecular weight, the electrical response of the resulting blends' thin films shows some differences. In the low range concentration, the blend thin films with high molecular weight PEO present coarser conducting paths than in those with the low molecular weight counterparts. For intermediate concentrations, a more effective phase segregation of PEDOT:PSS and PEO is achieved for high molecular weight PEO. These differences are also translated to different electrical conductivity.

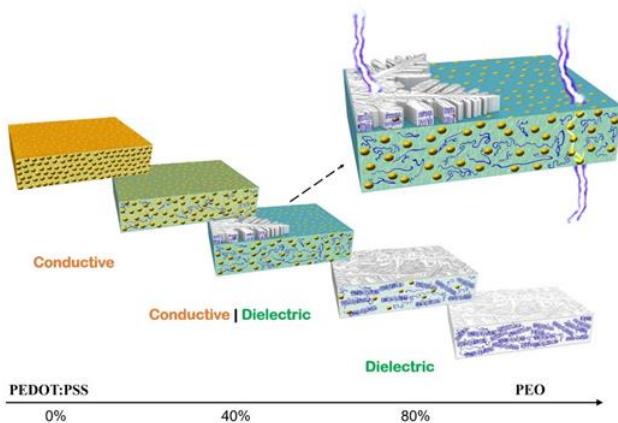


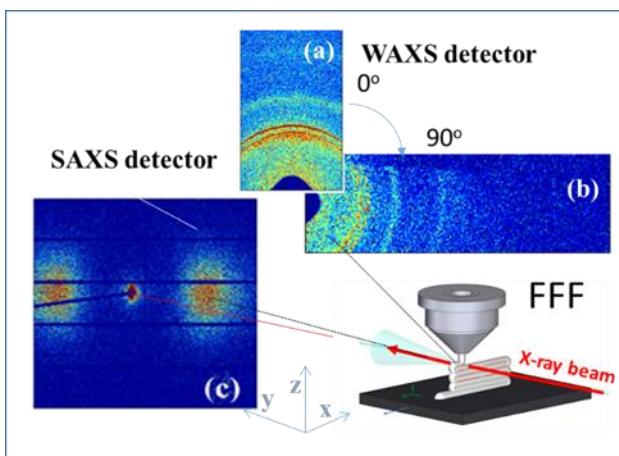
Figure 1. Cartoon showing the morphology and electrical phases of PEDOT:PSS/PEO blend thin films as a function of PEO concentration.

#### MICROPATTERNED FUNCTIONAL INTERFACES ON ELASTIC SUBSTRATES FABRICATED BY FIXING OUT OF PLANE DEFORMATIONS

In this work we demonstrate the fabrication of functional micropatterns on elastic substrates, specifically polydimethylsiloxane (PDMS). Rigid micropatterns have been fabricated by ozonation of PDMS under pressure. The surface pattern formed is directly dependent on the applied pressure, the mechanical properties of the elastic substrate as well as the dimensions and shape of the mask used to define the exposed and unexposed areas. In addition to the pattern formed, another interesting aspect is related to the diffusion of ozone within the material. PDMS with a lower Young's modulus allows more efficient diffusion and produces a thicker oxidized layer compared to rigid PDMS. The experimental results obtained were compared with simulations on the Von Misses stress distribution for solid plates, which has allowed finding the conditions in which the applied force results in the rupture of the oxidized rigid layer under permanent deformation.

## CRYSTALLIZATION OF POLYMER FILAMENTS *IN SITU* AND *OPERANDO* DURING 3D PRINTING BY X-RAY SCATTERING WITH SYNCHROTRON RADIATION

We have investigated the crystallization of the thermoplastic polymer poly(vinylidene fluoride) (PVDF) during a 3D printing process in operando mode. Wide and small angle X-ray scattering (WAXS-SAXS) simultaneous experiments were performed through the printed line with a resolution of 50 µm using an experimental system optimized for this purpose (Figure XX). Experiments indicate that crystallization is faster at the polymer-air interface than at other points within the printed line. The orientation of the crystalline lamellae is higher at both interfaces, suggesting a higher shear rate than in most of the printed line where flow elongation is dominant. The final levels of crystallinity at the different locations of the printed line are relatively low, compared to the values reported in the molten-pressed samples due to the extremely fast crystallization kinetics involved in the solidification of the printed lines. Therefore, 3D printed PVDF parts are expected to show significant structural modifications due to possible crystallization that will eventually occur during room temperature storage because the glass transition of PVDF is well below room temperature.



*Figure 2. Scheme for "operando" simultaneous SAXS/WAXS experiments with synchrotron radiation. An X-ray beam reaches the sample at a particular position. The diffracted WAXS (a, and b) intensity is recorded by a detector located close to the sample. The SAXS scattered intensity is collected by the SAXS detector located at a longer distance from the sample.*

## Group of BIOPHYSICS OF MACROMOLECULAR SYSTEMS

### GENERAL ASPECTS OF THE RESEARCH

We have delved into the experimental and simulation activities in the project "**Eco-Design of Packaging Commodity Polymers by Validated Multiscale Modelling (EcoPOL)**" granted by the MCINN in mid-2020. Likewise, we have begun collaborative activities within the framework of two research projects of Ecological and Digital Transition (TED), one of them with the Rey Juan Carlos University and IMDEA Energy, and the other with the Zaidin Experimental Station of CSIC (Granada) and the University of Seville. Both projects are circumscribed in the field of polymer recycling and the development and characterization of biopolymers of natural origin. Results have also been obtained in the project on the study of treatments for metastatic breast cancer with monoclonal antibodies, which is carried out under a contract with the Vall d'Hebrón Hospital Foundation. A new research contract has also been established with the "Contigo against breast cancer" Foundation, in the "in silico" study of conjugated monoclonal antibodies. Two collaboration contracts have been developed with the international company Total Energies. The activity carried out in collaboration with researchers from the ICTP, the UAH, and the UPV/EHU should be also highlighted. The main activities and results obtained in the different projects are described below.

#### Project "Eco-Design of Packaging Commodity Polymers by Validated Multiscale Modelling"

The main objective of this project is to establish a multiscale modeling protocol that describes the different interactions of polymers that are generally found in multilayer materials. A workflow to study multilayer materials has been developed by implementing it in the Python programming language. The workflow covers all stages from the first steps of preparation of structures to the calculation, equilibration and simulation of the material as well as the analysis of the results obtained. This workflow has been successfully applied to the study of multilayer materials made up of polyethylene and polypropylene without and with the presence of a block copolymer (PE/PP) that can act as a compatibilizer. In the case of polar polymers, the interaction potentials are not precise enough and models based on DFT are currently being developed to obtain new parameters, which will be validated with experimental information. On the other hand, the nature and intensity of these interactions have been studied from the experimental point of view, both between apolar polymers (olefinic) and in polar systems (multilayer systems). The study of the depression of the melting temperature in systems of controlled crystalline structure (single crystals) in the presence of other polymers, appears as a very powerful technique to determine the strength of interactions. The computer simulations are in perfect agreement with the experimental results, in the case of apolar systems. This approximation already gives the first clues about a design of multilayer systems for a successful subsequent recycling.

In this same context, a collaboration has begun with the ICTP, on the study of adhesive polymers that function as reversible "tie layers" that favor the separation of the multilayers at the end of their useful life. The rheological properties, together with the nanoindentation, give clues about the most suitable compositions to achieve an effective design of reversible adhesives.

### **Project on Study of the interaction of HER2-Monoclonal Antibodies**

In collaboration with the Vall d'Hebron Hospital and the "Contigo" Foundation against breast cancer, the biophysical characteristics of the interaction between a HER2 membrane receptor, whose overexpression in tumor cells is associated to more aggressive tumors, and specific monoclonal antibodies (*mAbs*) for this protein target are being studied. In recent years, successful therapies against breast cancer based on these *mAbs* have been developed. Specifically, two *mAbs* known as trastuzumab and pertuzumab are being used in therapies for advanced or metastatic breast cancer. Both antibodies target different domains of the HER2 receptor, so they are also used in combination therapies. In our group we have explored the affinity between each of those *mAbs* and HER2 estimating the free energy of association ( $\Delta G_{\text{binding}}$ ) both experimentally and by "in-silico" techniques. The results show a similar affinity for trastuzumab and pertuzumab in their interaction with the extracellular domain of HER2. It has also been observed that the biomolecule pertuzumab is able to associate two HER2 receptors, while trastuzumab preferentially associates a copy of this receptor. The results obtained are in the process of publication.

### **Polymeric materials with novel macromolecular topologies**

This line arises from the collaboration with a leading international company in the development of new materials. New experiments and theoretical models have been designed and applied to a series of newly synthesized materials of unknown molecular architecture. This idea arises from the impossibility of determining said architecture using conventional techniques. Specifically, this collaboration is articulated in three generic activities: (i) obtaining the rheological properties in a linear and non-linear regime, (ii) the application of theoretical computational models that make it possible to determine the corresponding molecular architecture, and (iii) the identification of the specific macromolecular topologies determining the measured properties. The very promising results point to a unique molecular architecture, which generates specific biological properties not seen before in this type of material. This research is part of a doctoral thesis project that has recently begun to be developed in our research group.

## **COLLABORATION WITH OTHER RESEARCH GROUPS**

With the **Department of Organic and Inorganic Chemistry of the University of Alcalá de Henares**, we are collaborating on a teaching innovation project entitled "Visualize symmetry". Our group is making a web application so that students can visualize and manipulate molecules based on their different symmetry. Several videos have been published on the Youtube channel of the University of Alcalá and on the website <http://symmetryuah.epizy.com/> (non-definitive address). In collaboration with Prof. Gerardo Jiménez from this department, DFT calculations have been carried out in the study of "New titanium catalysts with polydentate ligands" that have served as material in Valeria Hipólito Barriuso's Final Degree Project. We have also a collaboration with Drs. Vanessa Tabernero and Marta E.G. Mosquera, in the experimental field, on the study of new materials obtained through novel synthetic routes, as well as from sustainable sources such as polymyrcene and polyanethol. Systems in the form of nanoparticles have been synthesized, using a specially designed process, biocompatible and with possible applications in biotechnology. The rheological properties have turned out to be very interesting. The rheological master curves show characteristic viscoelastic relaxation with no elastic plateau, indicating that the systems behaved as non-entangled polymers. Analysis of the linear viscoelastic fingerprint reveals Zimm dynamics at intermediate frequencies typical of unentangled systems. This behavior resembles that observed in highly functionalized stars, dendrimers, soft colloids, and microgels. On the other hand, studies are being carried out on the properties of these novel materials, their applicability as plasticizer materials for polylactic acid (PLA) is being explored, a material of great interest given its biodegradability and its non-petroleum-dependent origin.

We collaborate with the **CSIC-INTA Center of Astrobiology** in the molecular and structural study of polysaccharides of natural origin, obtained from extremophile biofilms in Rio Tinto (Huelva). Research is being carried out on the characterization of the molecular and conformational properties of polysaccharides obtained from different microorganisms, resistant to acid media. The results point towards very high molecular weight in the biopolymers, in line with the rheological properties previously obtained in the original biofilms.

With **POLYMAT and the Department of Cell Biology and Histology of the University of the Basque Country**, we collaborate in the microrheological study of artificial tears. Research is being carried out on the application of the passive microrheology technique by light scattering in medicines applied to dry eye (artificial tears). The possibility of applying this technique to natural tears is also being explored. The results have been presented at the 2022 European Rheology Conference, held in Seville. The microrheological measurements are being compared with mechanical rheological measurements carried out by our collaborators at the **POLYMAT**.

With the **"Secretaría General Adjunta de Informática del CSIC"**, we are collaborating in the implementation and tuning of scientific software in the new High Performance System "Drago" for the scientific community of the CSIC.

## Capítulo 3

### PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN

*Chapter 3*

*RESEARCH PROJECTS*

### 3.1 DEPARTAMENTO DE QUÍMICA Y FÍSICA TEÓRICAS THEORETICAL PHYSICS AND CHEMISTRY

#### **El Universo Gravitacional Cuántico: Gravedad Cuántica, Cosmología Cuántica de Lazos y Ondas Gravitacionales.**

*Code or Reference:* PID2020-118159GB-C41.

*Funding Institution:* MICINN.

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

*Duration:* September 2021-August 2024.

*Objectives:* Consequences of the quantum nature of spacetime. Predictions of Loop Quantum Gravity, multi-fractional gravity with fractional derivatives and non-local quantum gravity. Gravitational-wave phenomenology of these theories, with reference to the future interferometers LISA and Einstein Telescope.

#### **Métodos de pocos y muchos cuerpos aplicados al estudio de núcleos exóticos.**

*Code or Reference:* PGC2018-093636-B-I00.

*Funding Institution:* MICINN.

*Main Researchers:* Pedro Sarriguren and Eduardo Garrido.

*Duration:* January 2019-December 2022.

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

#### **Pollutants and greenhouse gases in the atmosphere - understanding gas-gas and gas-solid interactions towards a cleaner atmosphere (ATMOS).**

*Code or Reference:* H2020-MSCA-RISE-2019-ATMOS-872081.

*Funding Institution:* European Commission.

*Main Researcher:* María Luisa Senent Diez.

*Duration:* April 2020-April 2024.

*Objectives:* Collaborative study of pollutants: identification, reactivity and capture. ATMOS represents a network of 11 institutions.

#### **Caracterización espectroscópica de moléculas no-rígidas y detectables en atmósferas, mediante métodos ab initio altamente correlacionados.**

*Code or Reference:* PID2020-112887GB-I00.

*Funding Institution:* MINECO.

*Main Researcher:* María Luisa Senent Diez.

*Duration:* September 2021-August 2024.

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

#### **Campos y gravedad: fronteras, física estadística y efectos de memoria.**

*Code or Reference:* PID2020-116567GB-C22

*Funding Institution:* MICINN.

*Main Researchers:* Eduardo Jesús Sánchez Villaseñor y Jesús Fernando Barbero González

*Duration:* September 2021-2024

*Objectives:* Study different aspects of field theories in bounded spacetime regions and problems in statistical physics.

#### **Dinámica, topología e integrabilidad en sistemas cuánticos de muchos cuerpos.**

*Code or Reference:* PGC2018-094180-B-I00

*Funding Institution:* MICINN.

*Main Researcher:* Rafael Alejandro Molina Fernández.

*Duration:* January 2019-December 2022.

*Objectives:* Study the dynamics of quantum many body systems with focus on topological quantum phases and integrable models.

#### **QUITEMAD+ Quantum Information and Technologies in Madrid.**

*Code or Reference:* S2018/TC-43-42

*Funding Institution:* Comunidad de Madrid.

*Main Researcher:* Miguel Ángel Martín Delgado (UCM) Participation: Jorge Dukelsky and Rafael Alejandro Molina Fernández.

*Duration:* January 2019-December 2022.

*Objectives:* Quantum information and quantum technologies.

**Cold Atom Physics Spain.***Code or Reference:* RED2018-102488-T*Funding Institution:* Ministerio de Ciencia e Innovación.*Main Researcher:* Michele Modugno (UPV) *Participation:* Rafael Alejandro Molina Fernández.*Duration:* January 2020-December 2022.*Objectives:* Spanish network for cold atom physics.

## 3.2 DEPARTAMENTO DE ESPECTROSCOPÍA NUCLEAR, VIBRACIONAL Y DE MEDIOS DESORDENADOS

*NUCLEAR, VIBRATIONAL AND DISORDERED MEDIA SPECTROSCOPY*

**Multiplexing Molecular Sensing and Dynamics Based on Plasmonic Effects Generated by Nanostructures.***Code or Reference:* PID2020-113900RB-I00*Funding Institution:* Ministerio de Ciencia e Innovación*Main Researcher:* Santiago Sanchez Cortés*Duration:* September 2021- September 2024*Objectives:* Application of plasmonic effects of nanostructures on the molecular detection of pollutants, biomolecules and materials with interest in the Cultural Heritage. Design and implementation of engineering commercial nanosensors based on plasmonic effects.**Development of nanosensor photonic systems for rapid virus detection using controlled evolution methods of protein platforms: the case of SARS-CoV-2.***Code or Reference:* 313011AUW6*Funding Institution:* European Union*Main Researcher:* Pavol Miskovsky*Duration:* January 2021-June 2023*Objectives:* Development of nanosensory photonic systems for rapid virus detection using controlled evolution methods of protein platforms: the case of SARS-CoV-2.**Open Scientific Community for Modern Interdisciplinary Research in Medicine (OPENMED).***Code or Reference:* 313011V455*Funding Institution:* European Union*Main Researcher:* Gabriel Zoldak*Duration:* November 2019-June 2023*Objectives:* The aim of the project is to solve selected problems of diagnosis and treatment of oncological, cardiovascular and viral diseases, diseases of the CNS and diseases of the musculoskeletal system with a unique use of the potential of partners in the project.**Óptica de Luz Magneto-Eléctrica in Medios Nanoestructurados Dieléctricos (MELODIA).***Code or Reference:* PGC2018-095777-B-C21.*Funding Institution:* Ministerio de Ciencia e Innovación.*Main Researchers:* Vincenzo Giannini/José A. Sánchez Gil.*Coordinator:* José A. Sánchez Gil.*Duration:* January 2019-December 2022.*Objectives:* The aim of the present proposal is the development (on the basis of the previously acquired experience and knowledge) of new theories, conceptual models, and computational tools able to explain and understand the rich phenomenology that emerges from state-of-the-art research areas such as the interaction of light with nano-structures exhibiting magneto-optical or magneto-electric responses. These subject matters are nowadays in the forefront of Physics and Optics/Photonics.**Bound-states-In-the-Continuum-based PLANar photonic devices towards 6G (BICPLAN6G).***Code or Reference:* TED2021-131417B-I00.*Funding Institution:* Ministerio de Ciencia e Innovación.*Main Researchers:* Vincenzo Giannini/José A. Sánchez Gil.*Duration:* December 2022-December 2024.*Objectives:* In this project, we plan to explore novel Bound-states-In-the-Continuum (BIC)-induced phenomenology emerging in planar arrays of metallic/semiconducting micron-size particles (called metasurfaces) in the THz and GHz domains with the aim of finding disruptive functionalities leading to planar (passive and active) photonic devices in those

spectral domains, that could be ultimately used as energy harvesters, wireless power transfer and sensors, with obvious interest in digital transition to the 5G and 6G regimes. These subject matters are nowadays in the forefront of THz Photonic.

**Metastable and active carbon-based materials for the storage and management of clean energy – novel physico-chemical strategies (MACMAT).**

*Code or Reference:* TED2021-129457B-I00

*Funding Institution:* Ministerio de ciencia e innovación- Unión Europea, NextGenerationEU

*Main Researchers:* Felix Fernandez Alonso, Pedro Braña Coto

*Duration:* 1 December 2022 –1 December 2023

*Objectives:* Study of processes and materials relevant for energy storage and management.

**Protontherapy and nuclear techniques for oncology.**

*Code or Reference:* B2017/BMD-3888

*Funding Institution:* Comunidad de Madrid

*Main Researcher:* María José García Borge

*Duration:* January 2018-December 2022 (including 1 year prolongation)

*Objectives:* Development of detectors for dose verification.

**Dinámica y Estructura de Nucleos Exoticos Estudiados en Experimentos.**

*Code or Reference:* PID2019-104390GB-I00

*Funding Institution:* Ministerio de Ciencia e Innovación

*Main Researcher:* Olof Tengblad.

*Duration:* July 2020-June 2023.

*Objectives:* The experimental study of the structure and dynamics of exotic nuclei and resonant states beyond the dripline. We research on the decay modes of exotic nuclei, in particular the breakup of unbound states, as well as the determination of cross-sections of astrophysical interest.

**Estudios contemporaneos experimentales y teóricos de la estructura nuclear de núcleos exóticos.**

*Code or Reference:* PID2020-118265GB-C41

*Funding Institution:* Ministerio de Ciencia e Innovación

*Main Researchers:* Andrea Jungclaus, K. Wimmer

*Duration:* September 2021-August 2024

*Objectives:* The experimental and theoretical study of the structure of exotic nuclei. The experimental work is mainly employing the technique of gamma-ray spectroscopy while the theoretical studies are based on the beyond mean field approach.

**DeepHyp - Deep learning techniques for the study of exotic hypernuclei.**

*Reference:* 2019-T1/TIC-13194

*Funding Institution:* Comunidad de Madrid

*Main Researcher:* Christophe Rappold

*Duration:* March 2020-Febrary 2024

*Objectives:* Study of exotic hypernuclei in high energy nuclear collisions. Development of machine and deep learning techniques for improving the experimental spectroscopy of hypernuclei.

**Hyp@FRS Machine learning methods applied to the spectroscopy of Hypernuclei: the puzzle of the hypertriton lifetime and of the nnLambda existence studied at WASA@FRS.**

*Code or Reference:* PID2020-118009GA-I00

*Funding Institution:* Ministerio de Ciencia e Innovación - Proyectos I+D+i 2020

*Main Researcher :* Christophe Rappold

*Duration:* September 2021 – September 2023

*Objectives:* Lifetime of hypertriton. Existence of nnLambda. Development deep learning techniques for tracking in magnetic field & ion-optics. Development of electronic readout for silicon micro vertex detector.

### 3.3 DEPARTAMENTO DE FÍSICA MOLECULAR MOLECULAR PHYSICS

#### **Linking ice, gas, and dust: laboratory astrochemistry (LILAC).**

*Code or Reference:* Programa i-LINK+2020, CSIC. Referencia LINKA20353

*Funding Institution:* CSIC

*Main Researcher:* Belén Maté Naya

*Duration:* 01/01/2021 - 31/12/2022

*Objectives:* Acquisition of experimental and theoretical information on ices containing complex organic molecules (COMs) to help to understand the formation and evolution of some of the COMs detected in the interstellar medium and in comets in our solar system; generation of carbonaceous residues from the processing of C and H containing ices; characterization of ions and radicals of astrophysical interest by high resolution infrared spectroscopy; diagnostics and kinetic modeling of cold plasmas with astrophysically relevant species; study of analogs of interstellar carbonaceous dust.

#### **Ligando gas, hielo y polvo: Astrofísica de laboratorio.**

*Code or Reference:* PID2020-113084GB-I00

*Funding Institution:* Ministerio de Ciencia e Innovación

*Main Researchers:* María Belén Maté and José Luis Doménech Martínez

*Duration:* 01/09/2021 – 31/08/2024

*Objectives:* Astronomical observations with cutting-edge instrumentation, laboratory high level experiments, theoretical work and models provide the tools to unveil our astrochemical origins. Expert teams in all these disciplines join forces in this project to study interstellar carbonaceous materials, ices and molecules, as they are key ingredients in astrochemical and astrophysical processes, as well as precursors of life on Earth.

#### **ATMOS. Pollutants and greenhouse gases in the atmosphere - understanding gas-gas and gas-solid interactions towards a cleaner atmosphere.**

*Code or Reference:* H2020-MSCA-RISE-2019-87208

*Funding Institution:* EUROPEAN COMMISSION. Horizon 2020 Research and Innovation Framework Programme

*Main Researcher:* Mª Luisa Senent Díez

*Duration:* April 2020-April 2023

*Objectives:* Collaborative effort on scientific problems related to atmosphere pollution elements, with an emphasis on training graduated students in atmospheric sciences, in state-of-the art experimental and theoretical studies of gas phase molecular systems, and their interactions with solids.

#### **Diagnóstico Raman avanzado: Microfluídica, colisiones moleculares y procesos fuera del equilibrio.**

*Code or Reference:* PID2021-123752NB-I00

*Funding Institution:* MICINN (Ministerio de Ciencia e Innovación)

*Main Researcher:* Guzmán Tejeda Gala y José María Fernández Sánchez

*Duration:* September 2022-August 2025

*Objectives:* Experimental study of inelastic intermolecular collisions involving small molecules that play important roles in atmospheric, astrophysical, and combustion processes, and development of non-intrusive Raman diagnostics in rarefied gas microflows.

#### **Caracterización estática y dinámica de CO<sub>2</sub> atmosférico: una contribución a mejores modelos climáticos.**

*Code or Reference:* TED2021-129619B-I00

*Funding Institution:* MICINN (Ministerio de Ciencia e Innovación)

*Main Researcher:* José María Fernández Sánchez

*Duration:* December 2022-November 2024

*Objectives:* Quantitative characterization of vib-rotational Raman spectrum of CO<sub>2</sub> for remote sensing by Raman-LIDAR, and relaxation of hot CO<sub>2</sub> by inelastic collisionsswith N<sub>2</sub> and O<sub>2</sub>.

### 3.4 DEPARTAMENTO DE FÍSICA MACROMOLECULAR MACROMOLECULAR PHYSICS

**Multidimensional micro and nano structuring of polymer materials by advanced technologies: from the fundaments to the applications. (MULTIMATPOL).**

*Code or Reference:* PID2019-107514GB-I00

*Funding Institution:* MICINN

*Main Researcher:* Aurora Nogales/Tiberio A Ezquerra

*Duration:* June 2020-May 2023

*Objectives:* Design of new structures at the nano and the microscale in polymer surfaces and bulk for applications in the field of renewable energies and sustainable plastics.

**Ciencia participativa con TeatrIEM: El certamen como semillero de textos teatrales actuales.**

*Code of reference:* FCT-21-16646

*Funding Institution:* FECYT

*Main Researcher:* Mari Cruz García Gutiérrez

*Duration:* June 2022-June 2023

*Objectives:* The main objective of this project is to support the scientific theater group TeatrIEM with the aim of improving the dissemination of science and attracting the interest of students towards a scientific career.

**Atrévete a ser científica: promoviendo las vocaciones científicas entre las adolescentes a través de la visibilización de las científicas y de los sesgos de género en la elección de las carreras STEM.**

*Code of reference:* FCT-21-16933

*Funding Institution:* FECYT

*Main Researcher:* Sagrario Martínez (Participation Aurora Nogales)

*Duration:* June 2022-June 2023

*Objectives:* To highlight the work of women working in Science, Technology, Engineering and Mathematics (STEM) to encourage their incorporation into these disciplines by creating references through the biographies of women scientists. Likewise, it is intended to know the factors that can affect the low choice of said STEM disciplines by female students, as well as knowing the vision of the problem from the point of view of the whole student body.

**Green processing of regenerated silk by multiple-scale structuring: from the fundaments to the applications. (GreenSilk4u).**

*Code or Reference:* TED2021-129845B-I00

*Funding Institution:* MICINN

*Main Researcher:* Mari Cruz García Gutiérrez/Aurora Nogales

*Duration:* December 2022-November 2024

*Objectives:* The main aim of this project, in the framework of the Ecological Transition and Digital Transition, is to investigate the optical and electrical properties of multiple-scale structured regenerated silk.

**Eco-Design of Packaging Commodity Polymers by Validated Multiscale Modelling (EcoPOL).**

*Funding Institution:* MICINN

*Main Researchers:* Javier Ramos/Juan Francisco Vega

*Other Participants:* J. Martínez-Salazar, Víctor L. Cruz and Virginia Souza-Egipsy

*Duration:* 1<sup>st</sup> June 2020 - 31<sup>st</sup> May 2023

*Budget:* 72.5 k€

*Objectives:* The ultimate goal of this project is the understanding of the interactions between the polymeric components usually found in multilayer films used in packaging by means of the multiscale modeling at different length-time scales.

**Nuevos polímeros bacterianos: aprovechando los recursos eco-renovables (BACTOPOL).**

*Funding Institution:* MICINN

*Main Researchers:* Daniel Pérez Mendoza y Juan Sanjuan Pinilla (EEZ/CSIC)

*Other Participants:* J. Ramos y J.F. Vega

*Duration:* 1<sup>st</sup> December 2022 – 30<sup>th</sup> November 2024

*Budget:* 293.25 k€

*Objectives:* Obtention and characterization of new biopolymers obtained form sustainable resources.

**Circularidad de los residuos plásticos de automoción: reciclado mecánico (CIRCLAPAR).***Funding Institution:* MICINN*Main Researchers:* Rafael García y Rafael van Rieken (ESCET/URJC)*Other Participants:* J. Ramos y J.F. Vega*Duration:* 1<sup>st</sup> December 2022 – 30<sup>th</sup> November 2024*Budget:* 180.40 k€*Objectives:* Mechanical recycling of polymeric residues from automotive industry.**PROYECTOS CON LA INDUSTRIA / PROJECTS WITH INDUSTRIAL COMPANIES****Estudios de la formación de complejos en disolución entre el dominio extracelular HER2 y anticuerpos monoclonales de relevancia en el cáncer de mama.***Code or Reference:* Research Agreement N° 20196519*Company:* Fundación Instituto de Investigación Oncológica Vall d'Hebron*Main Researcher:* Juan Francisco Vega*Other Participants:* Víctor L. Cruz, Javier Ramos and Virginia Souza-Egipsy*Duration:* 1st of December 2019 - 31st of May 2023*Budget:* 104.06 k€*Objectives:* Dual study of antibody-HER2 interactions with special relevance to biosimilar products.**On the effect of long chain branching on rheological properties of polyethylene.***Code or Reference:* Research Agreement N° 20205681*Company:* Total SE (France)*Main Researcher:* Juan Francisco Vega*Other Participants:* Andrés Cardil*Duration:* 26th November 2020 – 7th February 2022*Budget:* 67.9 k€*Objectives:* Rheological characterization of polymeric samples.**Molecular characterization by elongation rheological modelling.***Code or Reference:* Research Agreement N° 20215368*Company:* Total Energies One Tech (Belgium)*Main Researcher:* Juan Francisco Vega*Other Participants:* Andrés Cardil*Duration:* 1st September 2021 – 31st August 2022*Budget:* 81.5 k€*Objectives:* Rheological characterization and computational analisys of polymeric samples.**In-silico evaluation of the by-stander killing effect of antibody drug conjugates in the treatment of breast cancer.***Code or Reference:* Research Agreement N° 20230008*Company:* Fundación Contigo contra el cáncer de la mujer*Main Researchers:* Juan Francisco Vega y Javier Ramos*Other Participants:* Víctor L. Cruz*Duration:* 27th December 2022 – 26th December 2023*Budget:* 36.5 k€*Objectives:* In-silico study of antibody-drug conjugates used in breast cancer therapies.

## 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

**Gravitational wave physics and astronomy: Genesis** (*International non-EU congress*), Kyoto (Japan), 23<sup>rd</sup>-24<sup>th</sup> of January 2022.

- *Two types of quantum gravity* (Invited talk), Gianluca Calcagni.

**Caos y localización en sistemas cuánticos de muchos cuerpos** (*International non-UE congress*), Mexico D.F. (virtual) (Mexico), 24<sup>th</sup>-26<sup>th</sup> of January 2022.

- *Chaos in a deformed Dicke model* (Oral contribution), Ángel López Corps, Rafael A. Molina and Armando Relaño.
- *Estudiando la transición entre integrabilidad y caos en Liouvillianos cuánticos* (Oral contribution), Rafael A. Molina.

**IX Tux Workshop on Quantum Gravity** (*International non-UE congress*), Tux (Austria) + online, 14<sup>th</sup>-18<sup>th</sup> of February 2022.

- *An analytic investigation of pre-inflationary effects in the primordial power spectrum* (Oral contribution), Guillermo A. Mena Marugán and Beatriz Elizaga Navascués.
- *Investigating an alternative to the Hamiltonian calculation of the Ashtekar-Olmedo-Singh black hole model* (Oral contribution), Alejandro García-Quismondo and Guillermo A. Mena Marugán.

**ATMOS 2022, International Winter School on Atmospheric Chemistry Greenhouse gases and Pollutants** (*International non-UE congress*), Rabat (Morocco), 21<sup>th</sup>-26<sup>th</sup> of February 2022.

- *Quantum chemistry an essential support for atmospheric studies* (Invited talk), M.L. Senent.
- *How to write a research project* (Invited talk), M.L. Senent.

**2022 APS March Meeting** (*International non-UE congress*), Chicago (USA), 14<sup>th</sup>-18<sup>th</sup> of March 2022.

- *p-wave superconductivity induced from valley symmetry breaking in twisted trilayer graphene* (Oral contribution), José González and Tobias Stauber.
- *Effect of the external fields in high Chern number quantum anomalous Hall insulators* (Oral contribution), Yuriko Baba, Mario Amado, Enrique Díez, Rafael A. Molina and Francisco Domínguez-Adame.

**QFTCS Workshop** (*International non-UE congress*), online, 23<sup>rd</sup>-27<sup>th</sup> of May 2022.

- *Choice of vacuum state by asymptotic diagonalization in quantum cosmology* (Oral contribution), Guillermo A. Mena Marugán, Beatriz Elizaga Navascués and Thomas Thiemann.

**Prime Matters** (*International non-UE congress*), Madrid (Spain) 23<sup>rd</sup> of May 2022.

- *Exceptional spectral phase in a dissipative spin model* (Invited talk), J. Dukelsky.

**LISA Cosmology Working Group meeting** (*International EU congress*), online, 3<sup>rd</sup> of June 2022.

- *Membership Management Team (MMT)* (Invited talk), Gianluca Calcagni.

**Nano 2022** (*International non-UE congress*), Seville (Spain), 6<sup>th</sup>-10<sup>th</sup> of June 2022.

- *Effect of the electric field in high Chern number quantum anomalous Hall insulators* (Oral contribution), Yuriko Baba, Rafael A. Molina and Francisco Domínguez-Adame.

**V Workshop on Quantum Phase Transitions** (*National congress*), Granada (Spain), 8<sup>th</sup>-10<sup>th</sup> of June 2022.

- *Theory of dynamical phase transitions driven by excited-state quantum phase transitions* (Oral contribution), Ángel López Corps.

**Mathematical and Conceptual Aspects of Quantum Theory** (*International non-UE congress*), Oaxaca (Mexico) + online, 12<sup>th</sup>-17<sup>th</sup> of June 2022.

- *Quantum unitary dynamics in nonstationary spacetimes* (Invited talk), Guillermo A. Mena Marugán.

**I Simposio internacional de física y matemáticas** (*International non-UE congress*), Quito (Ecuador), 15<sup>th</sup> of June 2022.

- *Tecnologías cuánticas: promesas y realidades* (Invited talk), Rafael A. Molina.

**Quantum 2022** (*International non-UE congress*), Barcelona (Spain), 21<sup>st</sup>-23<sup>rd</sup> of June 2022.

- *Impact of the electric field in high Chern number quantum anomalous Hall insulators* (Oral contribution), Yuriko Baba, Mario Amado, Enrique Díez, Rafael A. Molina and Francisco Domínguez-Adame.

**LISA Astrophysics Working Group meeting** (*International EU congress*), Birmingham (UK), 22<sup>nd</sup> of June 2022.

- *LISA Internal Networking Committee for Science (LINCS)* (Invited talk), Gianluca Calcagni.

**10th International workshop on quantum phase transitions in nuclei and many-body systems** (*International non-UE congress*), Duvrovnik (Croatia), 10<sup>th</sup>-15<sup>th</sup> of July 2022.

- *Analogs of QPTs and ESQPTs in a dissipative spin model* (Oral contribution), Jorge Dukelsky.
- *Theory of dynamical phase transitions driven by excited-state quantum phase transitions* (Oral contribution), Ángel López Corps.

**Loops'22** (*International non-UE congress*), Lyon (France), 18<sup>th</sup>-22<sup>nd</sup> of July 2022.

- *Consistent and non-consistent deformations of gravitational theories* (contributed talk), Jesús Fernando Barbero González, Marc Basquens Muñoz, Bogar Díaz Jiménez and Eduardo Jesús Sánchez Villaseñor.

**EREP 2022** (*Interational non-UE congress*), Salamanca (Spain), 29<sup>th</sup> of August-2<sup>nd</sup> of September 2022.

- *Pre-inflationary effects on the primordial power spectrum for general relativity and loop quantum cosmology* (Oral contribution), Guillermo A. Mena Marugán and Beatriz Elizaga Navascués.
- *Space of solutions and quantization of the AOS black hole model* (Plenary talk), Beatriz Elizaga Navascués, Alejandro García-Quismondo and Guillermo A. Mena Marugán.

**DPG 2022** (*Interational UE congress*), Regensburg (Germany), 7<sup>th</sup> of September 2022.

- *Ising superconductivity induced from valley symmetry breaking in twisted trilayer graphene* (Oral contribution), Tobias Stauber and José González.
- *Chern insulators at finite magnetic fields in twisted bilayer graphene* (Poster), Miguel Sánchez, Tobias Stauber and José González.
- *Chern insulators in twisted bilayer graphene under hydrostatic pressure* (Poster), Israel Díaz, José González and Tobias Stauber.
- *Chern number control in quantum anomalous Hall insulators by external fields* (Poster), Yuriko Baba, Francisco Domínguez-Adame and Rafael A. Molina.

**Jornadas de investigadores noveles – Instituto de Estructura de la Materia 2022** (*National congress*), Madrid (Spain), 20<sup>th</sup> of October 2022.

- *Non-equilibrium dynamics and phase transitions in quantum mechanics* (Oral contribution), Ángel López Corps.

**Charlas de Empresa, Jornada Charlas de Empresas - Santa Tecla 2022** (*National congress*), Talavera de la Reina (Spain), 27<sup>th</sup> of October 2022.

- *Study of air pollutants using computational techniques* (Invited talk), M.L. Senent.

**New Trends in Mathematical Physics** (*International non-EU congress*), Moscow (Russia), 7<sup>th</sup>-12<sup>th</sup> of November 2022.

- *Fractional quantum gravity* (Invited online talk), Gianluca Calcagni.

**1<sup>st</sup> CAPS School on Ultracold Atoms 2022** (*Interational UE congress*), Regensburg (Germany), 16<sup>th</sup>-18<sup>th</sup> of November 2022.

- *Dynamical phase transitions in collective systems* (Poster), Ángel López Corps.

**Cold Atom Workshop 2022** (*National Congress*), Madrid (Spain), 24<sup>th</sup>-25<sup>th</sup> of November 2022.

- *Exceptional phase in a dissipative collective spin model* (Invited talk), Ángel López Corps, Álvaro Rubio-García, Armando Relaño, Rafael A. Molina, Francisco-José García Ramos and Jorge Dukelsky.
- *Model of screening in intrinsic disordered graphene* (Poster), Marta García Olmos.
- *Bound states in the continuum in cross shape junctions formed by one-dimensional wave guides* (Poster), Sofía Pinto, Rafael A. Molina and Pedro Orellana.

**41st TURKEY International Conference on “Chemical, Biological, Environment & Medical Sciences” (TCBEM-22)** (*International non-UE congress*), Istambul (Turkey), 15<sup>th</sup>-16<sup>th</sup> of December 2022.

- *Modeling of physical and chemical properties of hydrocarbons in interstellair medium using higly correlated ab initio methods: CAS of C<sub>5</sub>H and C<sub>5</sub>H* (Poster), S. C. Bennedjai, D. Hammoutène and M.L. Senent.

**XV Black Holes Workshop** (*International congress*), Lisbon (Portugal), 19<sup>th</sup>-20<sup>th</sup> of December 2022.

- *Polymeric quantization of the interior region of a Schwarzschild black hole* (Oral contribution), Beatriz Elizaga Navascués, Alejandro García-Quismondo and Guillermo A. Mena Marugán.

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

**Photooptics 2022**, (*International non-UE congress*), online, February 10<sup>th</sup>-11<sup>th</sup> of 2022.

- *Transparent metals* (Invited talk), A. Buendía, J. A. Sánchez-Gil and V. Giannini.

**XIII CPAN meeting (UE)** Huelva (Spain), 21<sup>st</sup>-23<sup>rd</sup> of March 2022.

- “*Consistency tests of the  $\beta^+$  decay of  ${}^8B$  with the R-Matrix formalism*” (Talk), D.F.Ruiz.
- “*Cross section studies of alpha clustering light nuclei*” (Talk), V.G.Tavora.
- “*Experimental tests of a scanner prototype for medical imaging with protons developed at IEM-CSIC*” (Talk), A.Nerio.

**Conferencia 13th International Spring Seminar on Nuclear Physics Perspectives and challenges in Nuclear structure after 70 years of shell Model** 16-20 de mayo de 2022 Sant Angelo d'Ischia (Italy).

- *Study of Highly Excited States of  ${}^8Be$  populated by beta decay of  ${}^8Be$*  (Conferencia Invitada) M.J. García Borge.

**10th Slovak Biophysical Symposium** (*National Conference*). Smolenice (Slovakia) May 3<sup>rd</sup>-5<sup>th</sup> of 2022

- *Structural in-depth analysis of iron complexes of tannic acid and other related polyphenols as revealed by spectroscopic techniques* (poster), A. Espina, S. Sanchez-Cortes, Z. Jurášeková.
- *Development of a new highly selective and sensitive detection method of the glyphosate pesticide by Surface-Enhanced Raman Scattering* (poster), F. Fuenzalida Sandoval, S. Sanchez-Cortes, P. Miškovský, Z. Jurášeková.

**JENAS2022** (*UE congress*), CSIC Madrid (Spain), May 3<sup>rd</sup>-6<sup>th</sup> of 2022.

- MJG Borge Organizer

**NanoSpain** (*International non-UE congress*), Madrid (Spain), May 17<sup>th</sup>-20<sup>th</sup> of 2022.

- *Exploiting orientation of anisotropic nanoparticles in topological plasmonic arrays* (Oral contribution), A. Buendía, J. A. Sánchez-Gil and V. Giannini.
- *Transparent metals* (Invited talk), A. Buendía, J. A. Sánchez-Gil and V. Giannini.
- *Extraordinarily transparent compact metallic metamaterials* (Oral contribution) Vincenzo Giannini.  
<https://www.nanospainconf.org/2022/programme.php?d=19>

**Topological Photonics**, (*International non-UE congress*), Donostia (Spain), June 1<sup>st</sup>-3<sup>rd</sup> of 2022:

- *Topological nanoparticles photonics* (Invited talk), Buendía, Sanchez-Gil, V. Giannini.
- *Exploiting orientation of anisotropic nanoparticles in topological plasmonic arrays* (Póster), A. Buendía, and V. Giannini.

**16th International Conference on Nanostructured Materials, NANO2022** (*International non-UE congress*), Spain, June 7<sup>th</sup> of 2022.

- *Self-assembled metal-dielectric metasurfaces produced by pulsed laser deposition for SERS detection* (Oral contribution), E. Soria, A. Caño, A Garcia-Leis, S. Sánchez-Cortés, and J. Gonzalo.

**Nanoplasm 2022**, (*International non-UE congress*), Cetraro (Italy), June 13<sup>th</sup>-17<sup>th</sup> of 2022.

- *Exploring “unconventional” topological nanoparticle photonics* (Invited talk), A. Buendía, J. A. Sánchez-Gil and V. Giannini.

**DREB 2022 Direct Reactions with Exotic Beams** (*UE*), Santiago de Compostela (Spain), June 26<sup>th</sup>-July 1<sup>st</sup>, 2022.

- M.J.G. Borge co-organizer
- Scattering of  ${}^{15}C$  on  ${}^{208}Pb$  at energies near the Coulomb barrier (Oral contribution), M.J.G. Borge, V.García Távora.

**HYP2022 14th International Conference on Hypernuclear and Strange Particle Physics** (*International non-UE*), Praga (República Checa), 27<sup>th</sup> June-1<sup>st</sup> July of 2022.

- *Unique approach for precise determination of binding energies of hypertriton and other hypernuclei with nuclear emulsion and machine learning* (Oral Contribution), Christophe Rappold & Samuel Escrig.

**5<sup>th</sup> International Conference on Innovation in Art Research and Technology** (*International non-EU congress*), París (Francia) 28<sup>th</sup> June–1<sup>st</sup> July 2022.

- *Impact of pH conditions in the SERS analysis of synthetic colorants: case study of monoazo dyes* (Oral contribution) M. V. Cañamares, Giulia Vannucci, and S. Sánchez-Cortés.

**XVI Congreso Nacional de Materiales (CNMÁT 2022) (NATIONAL)**, Ciudad Real (Spain), 28<sup>th</sup> June–1<sup>st</sup> July of 2022.

- *Nuevos sensores SERS basados en sustratos de silicato cárlico hidratado irradiados por láser* (Invited talk), Laura Maestro-Guijarro, Paula M. Carmona-Quiroga, Mohamed Oujja, Sagrario Martínez-Ramírez, Santiago Sanchez-Cortes, Marta Castillejo.

**XXVII Reunión Nacional de Espectroscopía and XI Iberian Conference of Spectroscopy International Conference (UE congress)**, Málaga (Spain) 5<sup>th</sup>-8<sup>th</sup> July 2022

- *Structural in-depth analysis of iron complexes of plant gall polyphenols by spectroscopic techniques: Implications in the analysis of historical manuscripts* (poster), A. Espina, S. Sanchez-Cortes, M. V. Cañamares, and Z. Jurašeková.
- *Analysis of two blue triarylmethane dyes by UV-Vis, FT-Raman and SERS spectroscopies* (Oral contribution), M. Rampa, S. Sánchez-Cortés, and M. V. Cañamares.
- *Spectroscopic analysis of mushrooms by Surface-enhanced Raman Scattering (SERS)* (poster), F. Puliga, V. Zuffi, A. Zambonelli, O. Francioso, and S. Sánchez-Cortés.
- *Detection of glyphosate pesticide by SERS: Development of a new highly selective and sensitive detection method* (poster), F. Fuenzalida Sandoval, S. Sanchez-Cortes, P. Miškovský, and Z. Jurašeková.
- *Tuning robust hotspots in plasmonic chains* (Poster), A. Buendía, J.A. Sánchez Gil, and V. Giannini.
- *A detailed IR, Raman spectroscopic and DFT theoretical analysis of commercial additives monosodium glutamate and xylitol* (Oral contribution), G. Wang, L. CortijoM. A. Moreno, M.V. Cañamares, and V. Timón.

**RESCHEDULED for 2022: Gordon Research Conference “Scientific Methods in Cultural Heritage” (International non-UE congress)**, Les Diablerets (Switzerland) July 10<sup>th</sup>-15<sup>th</sup> of 2022.

- *Micro-Raman characterization of the materials used in the original and overpaint layers of the polychrome Calvary altarpiece in the Forfoleda parish church, Salamanca (Spain)* (Poster), Carlos Ávila, Sonsoles Ortiz, Ruth Chércoles, and María Vega Cañamares.

**XXVIII REUNIÓN NACIONAL DE ESPECTROSCOPÍA (UE congress)**, Málaga (Spain), July 5<sup>th</sup>- 8<sup>th</sup> of 2022.

- *Tuning robust hotspots in plasmonic chains* (Poster), A. Buendía, J. A. Sánchez-Gil, and V. Giannini.

**META 2022, the 12th International Conference on Metamaterials, Photonic Crystals and Plasmonics (International non-UE congress)**, Torremolinos (Spain), July 19<sup>th</sup>- 22<sup>nd</sup> of 2022:

- *Bound states in the continuum and related phenomenology in resonant metasurfaces* (Invited talk), D. R. Abujetas, and J. A. Sánchez-Gil.
- *Tailoring polarization changes in all-dielectric metasurfaces by using quasi bound states in the continuum* (Invited talk), J. L. Pura, R. Kabonire, D. R. Abujetas and J. A. Sánchez-Gil.
- *Extraordinarily transparent compact metallic metamaterials* (Oral Contribution), Vincenzo Giannini.

**Mole Conference 2022, (International non-EU congress)**, Donostia (Spain), July 25<sup>th</sup>-29<sup>th</sup> of 2022.

- *Bound states in the continuum and related phenomenology in resonant metasurfaces through coupled-dipole theory* (Invited talk), D. R. Abujetas and J. A. Sánchez-Gil.

**CIOP 2022, (International non-UE congress)**, Xi'an (China), August 7<sup>th</sup>-13<sup>th</sup> of 2022.

- *Transparent metals* (Invited talk), A. Buendía, J. A. Sánchez-Gil and V. Giannini.
- *Extraordinarily transparent compact metallic metamaterials* (Invited talk), Vincenzo Giannini

**Euroschool On Exotic Beams:** La Rábida, Huelva (Spain) September 1<sup>st</sup>-7<sup>th</sup> of 2022.

- *"WASA@FRS HypHI Experiment: Study of light hypernuclei"* (Oral contribution), S. Escrig.
- V. García Távora (poster)
- D. Fernández Ruiz (poster)

**EMLG/JMLG (European/Japanese Molecular Liquids Group) annual meeting: Molecular liquids at interfaces (EMLG22) (International congress)**, Barcelona, September 12<sup>th</sup>-16<sup>th</sup> of 2022.

- *Metastable Confinement of Molecular Hydrogen in Double Wall Carbon Nanotubes bundles*, (Oral contribution) C. Cabrillo, R. Fernández-Perera, F. J. Bermejo, C. Mondelli, M. A. González, F. Fernández-Alonso, E. Enciso, and M.-L. Saboungi.

**LACONA XIII Lasers in the Conservation of Artworks (International non-UE congress)**, Florencia (Italia), September 12<sup>th</sup>-16<sup>th</sup> of 2022.

- *Development of new sers sensors based on the laser irradiation of the major hydration product of portland cement* (Oral contribution), L. Maestro Guijarro, P.M. Carmona Quiroga, S. Martínez Ramírez, S. Sánchez Cortés, M. Castillejo, M. Oujja.

**12th International Conference on LEEM/PEEM (LEEM PEEM 12)** (*International non-UE congress*), September 26<sup>th</sup>-30<sup>th</sup> of 2022.

- *Influence of the growth conditions on the magnetism of SrFe<sub>12</sub>O<sub>19</sub> thin films and the behavior of Co/SrFe<sub>12</sub>O<sub>19</sub> bilayers* (Poster), G.D. Soria, J.F. Marco, A. Mandziak, S. Sánchez-Cortés, M Sánchez-Arenillas, J.E. Prieto, J. Dávalos, M. Foerster, L. Aballe, J. López-Sánchez, J.C. Guzmán-Mínguez, C. Granados-Miralles, J de la Figuera, and A. Quesada.

**5<sup>th</sup> International Workshop on Dynamics in Confinement (Confit22)** (*International congress*), Grenoble, October 11<sup>th</sup>-13<sup>th</sup> of 2022.

- *Metastable Confinement of Molecular Hydrogen in Double Wall Carbon Nanotubes bundles*, (Oral contribution) C. Cabrillo, R. Fernández-Perera, F. J. Bermejo, C. Mondelli, M. A. González, F. Fernández-Alonso, E. Enciso, and M.-L. Saboungi.

**European Nuclear Physics Conference (EuNPC)** (*UE congress*), Santiago de Compostela (Spain) October 24<sup>th</sup>-28<sup>th</sup> of 2022.

- "Study of light hypernuclei in Europe: the hypertriton and nnΛ puzzles" (Oral contribution), C. Rappold.
- "R-Matrix study of the beta decay of <sup>8</sup>B to the highly excited states of <sup>8</sup>Be" (Oral contribution), D.F. Ruiz.
- "Scattering of <sup>15</sup>C on <sup>208</sup>Pb at energies near the Coulomb barrier" (Oral contribution), V.G. Távora.
- "Experimental tests of the scanner prototype for imaging with protons developed at IEM-CSIC" (Oral contribution), A.Nerio.
- "Reaction studies with neutron-rich light nuclei at the upgraded SEC Device: Testing the parity inversion in <sup>11</sup>Li" (Poster), D.F. Ruiz.

**XIV CPAN meeting** (*UE cogress*), Bilbao (Spain), November 23<sup>rd</sup>-25<sup>th</sup> of 2022.

- "R-Matrix study of the beta decay of <sup>8</sup>B to the highly excited states of <sup>8</sup>Be" (Oral contribution), D.F.Ruiz,
- "Scattering of <sup>15</sup>C on <sup>208</sup>Pb at energies near the Coulomb barrier" (Oral contribution), V.G.Távora.
- *Experimental tests of the scanner prototype for imaging with protons developed at IEM-CSIC* (Oral contribution), A. Nerio, J.A. Briz, M.J.G. Borge, E. Nacher, O. Tengblad, A. Perea and V.G. Távora.

**International Conference on Terahertz Emission, Metamaterials and Nanophotonics (TERAMETANANO 2022)**, (*International non-UE congress*), Natal (Brazil), December 15<sup>th</sup>- 21<sup>st</sup> of 2022:

- *Casimir nanoparticle levitation in vacuum* (Invited talk), A. Buendía and V. Giannini.
- *Minimizing effects of long-range interacitions in topological protection of plasmonic arrays* (Contributed talk), A. Buendía, J. A. Sánchez-Gil, and V. Giannini.

#### Reuniones de colaboración

- SuperFRS Experiment collaboration meeting: 30<sup>th</sup> March-1<sup>st</sup> April: Samuel Escrig & Christophe Rappold: Talk "Performance of the WASA fiber detectors" by Samuel Escrig
- R3B collaboration meeting 7<sup>th</sup>-9<sup>th</sup> June: Christophe Rappold
- NUSTAR Collaboration meeting: 19<sup>th</sup>-23<sup>th</sup> Sept.: Christophe Rappold
- SuperFRS Experiment collaboration meeting: 15<sup>th</sup>-16<sup>th</sup> Dec.: Christophe Rappold & Samuel Escrig
- R3B-meeting, 15<sup>th</sup>-19<sup>th</sup> Nov Catania (Italia): O. Tengblad

#### 4.1.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS

**ATMOS 2022, International Winter School on Atmospheric Chemistry Greenhouse gases and Pollutants** (*International non-UE congress*), Rabat (Morocco), 21<sup>th</sup>-26<sup>th</sup> of February 2022.

- *Spectroscopy and inelastic collisions of atmospheric molecules* (Invited talk), J.M. Fernández.
- *Towards classical to ab initio molecular dynamics and complex phenomena: from classical force-field methods to novel neural network and machine learning potentials* (Invited talk), V. Timón.

**XIII Jornadas de Jóvenes Investigadores en Física Atómica y Molecular (J2IFAM).** (*National*), Santiago de Compostela, 15<sup>th</sup>-17<sup>th</sup> of March 2022.

- *Ro-vibrational relaxation of CO<sub>2</sub> in supersonic jets: A fluid dynamic, kinetic and thermodynamic study by Raman spectroscopy* (Oral presentation). C. Alvarez, J. M. Fernández, and G. Tejeda y S. Montero.

**EAS (European Astronomical Society) Annual Meeting 2022, Symposium S9: The Astrochemical Heritage** (*International non-UE congress*), Valencia, 27<sup>th</sup> of June-1<sup>st</sup> of July 2022.

- *Urea in astronomical ices: IR spectra and stability under energetic processing* (Oral contribution), V. J. Herrero, I. Tanarro, V. Timón, G. Muñoz-Caro, H. Carrascosa, I. Jiménez-Serra and B. Maté.

- *Indene on interstellar grains: IR spectra, stability and decomposition products under energetic processing* (Poster), B. Maté, I. Tanarro, V. J. Herrero, V. Timón, and J. Cernicharo.
- *Thermal desorption of acetaldehyde from interstellar ices combining experiments and computer simulations* (Poster), B. Maté, G. Molpeceres, J. Kästner, V. J. Herrero, and R. J. Peláez.

**32<sup>nd</sup> International Symposium on Rarefied Gas Dynamics (RGD32).** (*International non UE*), Seoul (South Korea), 4<sup>th</sup>-8<sup>th</sup> of July 2022.

- *Vibrational Relaxation and Heat Capacity of CO<sub>2</sub> under Non Thermodynamic Equilibrium* (Invited talk). J.M. Fernández, C. Alvarez, G. Tejeda and S. Montero.
- *Rotational Relaxation of CO<sub>2</sub> in Supersonic Jets: A Gas Dynamic and Kinetic Study by Raman Spectroscopy* (Oral contribution). C. Alvarez, J.M. Fernández, G. Tejeda and S. Montero.

**XXVII Reunión Nacional de Espectroscopía, XI Congreso Ibérico de Espectroscopía (International congress)**, Málaga, 5<sup>th</sup>-8<sup>th</sup> of July 2022.

- *Carbonaceous dust specific surface area determination using grazing-angle reflection-absorption IR spectroscopy* (Oral contribution), Belén Maté, Ricardo Carrasco-Herrera, Ramón J. Peláez, Victor J. Herrero, Julio Santos, Miguel Jiménez-Redondo and Isabel Tanarro.
- *A detailed IR, Raman spectroscopic and DFT theoretical analysis of commercial additives monosodium glutamate and xylitol*. Vicente Timón Salinero.

**i-LINK+ workshop. Linking ice, gas and dust in laboratory astrophysics (International congress)**, Garching (Germany), 11<sup>th</sup>-13<sup>th</sup> of July 2022.

- *Cosmic rays effects on low density interstellar dust analogues* (Invited lecture), Ramón J. Peláez, M. Jiménez-Redondo B. Maté, I. Tanarro, V. J. Herrero, I. Topala, I.C. Gerber, Bucharest Tandetron 3 MV Accelerator's team.
- *Energetic processing of COMs in ices* (Invited lecture), Belén Maté, Isabel Tanarro, Victor J. Herrero, Vicente Timón, Guillermo Muñoz-Caro, Izaskun Jiménez-Serra, and José Cernicharo.
- *Vibration-rotation spectroscopy of molecular ions at IEM-CSIC*, José Luis Doménech.

**Europhysics Conference on the Atomic and Molecular Physics of Ionized Gases, ESCAMPIG 2022 (International congress)**, Paris (France), 19<sup>th</sup>-23<sup>rd</sup> of July 2022.

- *High-resolution, broadband, rotational emission spectroscopy in cold plasmas for laboratory astrophysics* (Poster), I. Tanarro, C. Bermúdez, C. Cabezas, J.L. Doménech, V. J. Herrero, R. J. Peláez, J. M. Hernández, J. D. Gallego, and J. Cernicharo.
- *Gas-phase polymerisation and particle structure in dusty acetylene plasmas* (Poster), V.J. Herrero, M. Jiménez-Redondo, L. Díaz-Pérez, R. J. Peláez, B. Maté, and I. Tanarro.

**9<sup>th</sup> Central European Symposium on Plasma Chemistry (CESPC9) + COST Action CA19110 Plasma Applications for Smart and Sustainable Agriculture (PlAgri) (International congress)**, Vysoké Tatry (Slovakia), 4<sup>th</sup>-9<sup>th</sup> of September 2022.

- *Revision of 3.4 μm band destruction rates under ion beam irradiation of hydrogenated amorphous carbon as interstellar dust analogues* (Oral contribution), I. Mihaila, I.C. Gerber, M. Straticiuc, D. Iancu, R. Andrei, I. Burducea, B. Mate, R. J. Pelaez, V.J. Herrero, I. Tanarro, C. Pirim, A. Faccinetto, D. Duca, Y. Carpentier, C. Focsa, V. Pohoata, and I. Topala.

**XXIV International Conference of Horizons in Hydrogen Bond Research. (International Non-EU congress)**, Bilbao 12<sup>th</sup>-15<sup>th</sup> of September 2022.

- *Hydrogen bonds in ices of astrophysical and atmospheric interest*. (Invited Lecture), Belén Maté, Victor J. Herrero, Rafael Escribano, V. Timón, Juan Ortigoso, Óscar Gálvez, Beatriz Martín-Llorente, Delia Fernández-Torre, Yamilet Rodríguez-Lazcano, and M. A. Satorre.

**XVI Iberian Joint Meeting on Atomic and Molecular Physics (IBER2022).** (*International*), Málaga, 21<sup>st</sup>-23<sup>th</sup> of September 2022.

- *Raman Spectroscopy of High-Temperature Supersonic Jets of CO<sub>2</sub>* (Oral contribution). C. Alvarez, G. Tejeda, and J. M. Fernández.
- *Rotational and Vibrational Relaxation of CO<sub>2</sub> in Supersonic Jets* (Oral contribution). C. Alvarez, G. Tejeda and J. M. Fernández.

**The 7<sup>th</sup>\* Chile-Cologne-Bonn-Symposium Physics and Chemistry of Star Formation. (International Non-EU congress)**, Puerto Varas, Chile, September 26<sup>th</sup>-30<sup>th</sup>, 2022

- *Spectroscopic studies of acylium- and thioacylium ions* (Poster), S. Thorwirth, O. Asvany, T. Salomon, M. Bast, P. Schmid, I. Savic, M. E. Harding, J.L. Doménech, and S. Schlemmer.

**iPlasmaNano-XI, The 11th International Symposium on Plasma Nanoscience (International Non-EU congress), Seville, 4<sup>th</sup>-8<sup>th</sup> of November 2022.**

- *From polyyynes to polyaromatics. C<sub>2</sub>H<sub>2</sub> plasmas for the production of interstellar dust analogues* (Invited Lecture), V. J. Herrero, M. Jiménez Redondo, I. Tanarro, R. Peláez, B. Maté, R. Carrasco, H. Sabbah, C. Joblin.

**i-LINK+ workshop. Linking ice, gas and dust in Laboratory AstroChemistry (International congress), Madrid, 23<sup>rd</sup>-25<sup>th</sup> of November 2022.**

- *C<sub>2</sub>H<sub>2</sub> plasmas for the production of interstellar dust analogues. Gas-phase reactions and solid particles.* V.J. Herrero, M. Jiménez Redondo, I. Tanarro, R. J. Peláez, B. Maté, R. Carrasco, H. Sabbah, and C. Joblin.
- *Rotational and Vibrational Relaxation of HotCO<sub>2</sub>*(Invited talk). J. M. Fernández.
- *iCOMs in ices: IR spectra, UV and Cosmic Rays processing* (Invited talk), Belén Maté, Isabel Tanarro, Victor J. Herrero, Vicente Timón, Guillermo Muñoz-Caro, Izaskun Jiménez-Serra, and José Cernicharo.
- *Indene in ices: IR spectra, UV and Cosmic rays processin* (Invited talk), Belén Maté.
- *Endurance of amino acids in Martian phyllosilicates* (Invited talk), V. Timón Salinero.

#### 4.1.4 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

**Annual European Rheology Conference, AERC 2022** (Intenational UE-congress) Sevilla (Spain), 26<sup>th</sup>-28<sup>th</sup> of April 2022.

- *Tears for microrheology: Experimental study of artificial eyedrops* (Oral contribution), J.F. Vega, M. Fernández, I. Calafel, I. Martínez-, A. Pérez Sarriegui, and A. Acera.
- *Reactive extrusion of PLA: Rheological indicators for long chain branching (LCB) detection* (Poster), M. Fernández, A.J. Sandoval, J.F. Vega, A. Santamaría, M. L. Di Lorenzo and A. J. Müller.

**XVI Reunión del Grupo Especializado de Polímeros GEP de la Real Sociedad Española de Química (RSEQ) y de la Real Sociedad Española de Física (RSEF), XVII Simposio Latinoamericano de Polímeros, XV Congreso Iberoamericano de Polímeros (International non-UE congress), San Sebastián (Spain), 8<sup>th</sup>-12<sup>th</sup> of May 2022.**

- *Multiscale simulations applied to polyolefin crystallization* (Oral contribution), J. Ramos; J. F. Vega and J. Martínez-Salazar.
- *Study of polymer interactions for the eco-design of packaging multilayers* (Oral contribution), J.F. Vega, V. Souza-Egipsy, M.T. Expósito, J. Ramos and J. Martínez-Salazar.
- *cPGMA-lysozyme assemblies with effective antimicrobial properties* (Poster), M. Palenzuela, L. Valenzuela; G. Amariei, J.F. Vega, M.E.G. Mosquera and R. Rosal.

**POLY-CHAR 2022** (International non-UE congress) Halle | Siegen (Germany), 22<sup>th</sup>-25<sup>th</sup> of May 2022.

- *Relationship between creep and molecular architecture in thermoreversible polyurethane adhesives for ecofriendly multilayer packaging* (Oral contribution), A. Flores, J.F. Vega, H. Seyler, S. Quiles-Díaz, M.A. Gómez-Fatou and H.J. Salavagione.

**Chemeet 2022** (International non-UE congress), Online, 27<sup>th</sup>-29<sup>th</sup> of June 2022.

- *Ferroelectric Poly(vinylidene fluoride) (PVDF) Nanoparticles Pre-pared by Dialysis Nanoprecipitation* (Invited talk) Aurora Nogales.

**CNMAT2022. Congreso Nacional de Materiales** (National congress), Ciudad Real (Spain), 28<sup>th</sup>-30<sup>th</sup> of June 2022.

- *Nanoestructuras superficiales inducidas por láser en polímeros ferroeléctricos* (Oral presentation) J. Cui, A. Nogales, T.A. Ezquerra, and E. Rebollar.

**XXVII Reunión Nacional de Espectroscopía - XI Congreso Ibérico de Espectroscopía (XXVII RNE – XI CIE) (UE), Málaga (Spain), 5<sup>th</sup>-8<sup>th</sup> of July 2022.**

- *Mid-infrared spectroscopy of aliphatic molecular ices exposed to UV radiation in dense molecular clouds* (Contributed talk) G. Tajuelo-Castilla, M. Accolla, J.M. Sobrado, G.J. Ellis, J. Mendieta, P. Jelinek, J.A. Martín-Gago, and G. Santoro.

**11<sup>th</sup> Conference on Broadband Dielectric Spectroscopy and its Applications (BDS2022)** (International non-UE congress), San Sebastian, 4<sup>th</sup>-9<sup>th</sup> of September 2022.

- *Is the sub-glass temperature relaxation of furan-based polymers related to their high gas barrier properties?* (Invited talk), T.A. Ezquerra.
- *Dielectric spectroscopy in Polyvinylidene Difluoride based ferroelectric systems* (Invited talk), Aurora Nogales.

**X AUSE Congress & V ALBA User Meeting** (*International non-UE congress*), Barcelona (Spain), 5<sup>th</sup>-8<sup>th</sup> of September 2022.

- *A retrospective view of synchrotron radiation in polymer science at ALBA and a dream for the future* (Invited talk), Mari Cruz García Gutiérrez.

**1<sup>a</sup>Jornada de investigadores noveles del IEM** (*National congress*), Madrid (Spain), 20<sup>th</sup> of October 2022.

- (*Organizer*) Aurora Nogales
- *Reología de nanogeles de poliglicidil metacrilato* (Oral contribution), Andrés Cardil.
- *The fear of periodic surfaces to water* (Oral contribution), Patricia Martínez García.
- *P3HT:PCBM, the most efficient organic solar cell material... and more* (Oral contribution), José Sena Fernández.

**La Máscara Virtual. Filosofía y Ciencia en el Teatro Hispánico** (*International non-UE congress*), Alcalá de Henares, Madrid, 2-4<sup>th</sup> of November 2022.

- *TeatrIEM: Teatro y Ciencia* (Invited talk) Mari Cruz García Gutiérrez.

**ALBA II Long Beamlines Workshop** (*UE congress*), Barcelona, 5<sup>th</sup>-8<sup>th</sup> of September 2022.

- *Probing matter at the nano-to-mesoscale in the real and reciprocal space with chemical and bond-orientation sensitivity* (Invited talk) Mari Cruz García Gutiérrez, Gonzalo Santoro, and Jaime Hernández.

**6º Congreso Nacional de Medio Ambiente, CONAMA 2022** (*National congress*), Madrid (Spain), 21<sup>st</sup>-24<sup>th</sup> of November 2022.

- *El papel de las poliolefinas en el ecodiseño de filme multicapa reciclado mecánicamente* (Panel), M. T. Expósito, J.F. Vega, V. Souza-Egipsy, B. Paredes, V. Cruz and J. Ramos.
- *Transformación digital de la cadena de valor del residuo*, *Ponencia del Comité Técnico (CT-32)*, M.T. Expósito and J. Guaita.

**Nano meets Soft 2022** (*UE congress*), UNED-Madrid (Spain), 19<sup>th</sup> of December 2022.

- *3D Printing Assisted Nano Imprint Lithography (3DPANIL). Phantasy or reality?* (Contributed talk) Tiberio A Ezquerro.
- *Conductive/insulator blend thin films based on furanaromatic rings* (Contributed talk), Mari Cruz García-Gutiérrez.
- *10 years preparing Polymer Nanoparticles at Softmatpol. What's done, what can be done* (Contributed talk) Aurora Nogales.
- *Modification of Kapton wettability by laser nanostructuring* (Contributed talk) Patricia Martínez.
- *Sputtering Gas Aggregation Sources for controlled nanoparticle fabrication* (Contributed talk) Gonzalo Santoro.
- *Application of P3HT and P3HT:PCBM nanoparticles as photodegrading agents for polluting dyes* (Contributed talk) José Sena.

## 4.2. ESTANCIAS DE INVESTIGADORES EN EL INSTITUTO VISITORS

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

- ❖ **Dr. Mohammed Salah**, LS3MN2E, Department of Chemistry, Mohammed V University, Faculty of Sciences Rabat, Morocco, 1<sup>st</sup> of July-10<sup>th</sup> of September 2022.
- ❖ **Dr. Alexander López**, Escuela Superior Politécnica del Litoral, Guayaquil, Ecuador, 3<sup>rd</sup>-30<sup>th</sup> of September 2022.
- ❖ **Dorsal Missoussi**, LSAMA Tunis-El Manar University, 28<sup>th</sup> of September-31<sup>rd</sup> of December 2022.
- ❖ **Sofía Catalina Pinto Muñoz**, Universidad Técnica Federico Santa María, Chile, 1<sup>st</sup>-22<sup>nd</sup> of October 2022.
- ❖ **Sinda Brahem**, LSAMA, Tunis-El Manar University, 9<sup>th</sup> of October-31<sup>rd</sup> of December 2022.
- ❖ **Sofía Catalina Pinto Muñoz**, Universidad Técnica Federico Santa María, Chile, 6<sup>th</sup>-30<sup>th</sup> of November 2022.
- ❖ **Prof. Gustavo Scuseria**, Rice University, USA, 9<sup>th</sup>-16<sup>th</sup> of November 2022.
- ❖ **Prof. Damiano Anselmi**, Pisa University, Italy, 12<sup>th</sup>-16<sup>th</sup> of December 2022.
- ❖ **Dr. Diego Alcoba**, University of Buenos Aires, Argentina, 19<sup>th</sup>-31<sup>st</sup> of December 2022.

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

- ❖ **Mr. Salvatore Rapisarda**, predoctoral student (PhD thesis), University of Bologna (Italy), 1<sup>st</sup> of January–31<sup>st</sup> March 2022.
- ❖ **Ms. Michela Rampa**, Erasmus+ Program student (postgraduated), University of La Sapienza di Roma, Italy, 1<sup>st</sup> of January–30<sup>th</sup> July 2022.
- ❖ **Ms. Francisca Fuenzalida Sandoval**, Erasmus+ Traineeship Program, (PhD thesis), 1<sup>st</sup> of June–31<sup>st</sup> December 2022.
- ❖ **Mr. Federico Puliga**, Predoctoral stay (PhD Thesis) University of Bologna (Italy), 1<sup>st</sup> of May–31<sup>st</sup> July 2022.
- ❖ **Dr. Guilherme Dognani**, postdoctoral stay, State University of Sao Paulo, Presidente Prudente (Brazil), 7<sup>th</sup> June–31<sup>st</sup> December 2022.
- ❖ **Ms. Laura Pérez López**, Estudiante de prácticas extracurriculares, Universidad Complutense de Madrid, 17<sup>th</sup> October–31<sup>st</sup> December 2022.
- ❖ **Mr. Marcelo José Dos Santos Oliveira**, Master student (Master Thesis), State University of Sao Paulo, Presidente Prudente (Brazil), 20<sup>th</sup> October 31<sup>st</sup> December 2022.
- ❖ **Dr. Belén Hernández** Associated Professor, Université Paris 13, Paris, France, 3<sup>rd</sup>-6<sup>th</sup> of May, 12<sup>th</sup>-16<sup>th</sup> September of 2022.
- ❖ **Dr. Zuzana Jurasekova**, Assistant Professor, P.J. Safarik University of Kosice, Slovak Republic, 7<sup>th</sup>-16<sup>th</sup> of November 2022.
- ❖ **Prof. M. Valle Ojeda Calvo**, Full Professor, Università Ca' Foscari di Venezia (Italy), 15<sup>th</sup> -17<sup>th</sup> March 2022.
- ❖ **Prof. Jaime Gómez Rivas**, Technical University of Eindhoven, The Netherlands, 27<sup>th</sup>-29<sup>th</sup> of November 2022.

#### **4.2.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS**

- ❖ **Dra. Barbara Michela Giuliano**, Max Plank Institut for Extraterrestrial Physics, Garching, Alemania, 21<sup>st</sup>-25<sup>th</sup> of March 2022.
- ❖ **D. Davide Alberton**, Max Plank Institut for Extraterrestrial Physics, Garching, Alemania, 21<sup>st</sup>-25<sup>th</sup> of March 2022.
- ❖ **Dr. Miguel Jiménez Redondo**, Max Plank Institut for Extraterrestrial Physics, Garching, Alemania, 21<sup>st</sup>-25<sup>th</sup> of November 2022.
- ❖ **Dra. Samira Dalbouha**. Universidad Mohammed V de Rabat (Marruecos). 8<sup>th</sup> June–20<sup>th</sup> September 2022.
- ❖ **Dr. Stéphane Colin**, Université Toulouse III - Paul Sabatier, 8<sup>th</sup> June 2022.
- ❖ **Dr. Christine Barrot**, Université Toulouse III - Paul Sabatier, 8<sup>th</sup> June 2022.
- ❖ **Dr. Marcos Rojas-Cárdenas**, Université Toulouse III - Paul Sabatier, 8<sup>th</sup> June 2022.
- ❖ **Slaven Bajic**, PhD student. Université Toulouse III - Paul Sabatier, 8<sup>th</sup> June, and 17<sup>th</sup> October–20<sup>th</sup> November 2022.

### **4.3. CONFERENCIAS DE INVESTIGADORES INVITADOS INVITED RESEARCHERS CONFERENCES**

#### **4.3.1 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS**

- ❖ **Dr. Barbara Michela Giuliano** (Research Scientist),  
Max Planck Institute for Extraterrestrial Physics, Garching, Alemania,  
*Optical properties investigation of interstellar ice analogs*  
23 of March 2022.
- ❖ **Davide Alberton** (PhD student),  
Max Planck Institute for Extraterrestrial Physics, Garching, Alemania,  
*High resolution spectroscopy for astrochemical purposes*  
24 of March 2022.

## 4.4. VISITAS DE INVESTIGADORES A CENTROS INTERNACIONALES VISITS TO FOREING INSTITUTIONS (DE UNA SEMANA O MÁS / LONGER THAN A WEEK)

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

#### **María Luisa Senent Diez**

- LS3MN2E, Department of Chemistry, Mohammed V University, Faculty of Sciences Rabat, Morocco, 15<sup>th</sup> of February-26<sup>th</sup> of February 2022.
- LS3MN2E, Department of Chemistry, Mohammed V University, Faculty of Sciences Rabat, Morocco, 11<sup>th</sup> of May-31<sup>sp</sup> of May 2022.

#### **Gianluca Calcagni**

- Nagoya University, Japan, 3<sup>rd</sup> of July – 15<sup>th</sup> of August 2022.
- Waseda University, Tokyo, Japan, 16<sup>th</sup> of August – 4<sup>th</sup> of September 2022.

#### **Eduardo Garrido Bellido**

- Institute of Physics and Astronomy, University of Aarhus, Denmark, 29<sup>th</sup> of May-4<sup>th</sup> of June 2022.

#### **Ángel López Corps**

- Charles University, Prague, Czech Republic, 5<sup>th</sup>-30<sup>th</sup> of September 2022.

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

#### **Santiago Sánchez Cortés**

- Dipartimento di Scienze e Tecnologie Agro-Alimentari. Università degli Studi di Bologna (Italia), 3<sup>rd</sup>-11<sup>th</sup> September 2022.

#### **José A. Sánchez Gil**

- Nano-Institute, Ludwig-Maximilian University, Germany, 3<sup>rd</sup>-7<sup>th</sup> of October 2022.
- Technology Innovation Institute, Abu Dhabi, UAE, 14<sup>th</sup>-18<sup>th</sup> of November 2022.

#### **Álvaro Buendía Gallego**

- Instituto de Telecomunicações, Instituto Superior Técnico, Lisbon, Portugal, 3<sup>rd</sup>-14<sup>th</sup> of July 2022.

#### **Centre Bronowice en Cracovia (Polonia) Experimento de pCT imaging**

- 15–26 June; 2022, MJG Borge, V. García Tavora, A. Perea, O. Tengblad, A. Nerio.
- 7–13 December, 2022, V. García Távora, A. Perea, O. Tengblad, A. Nerio.

#### **ISOLDE, CERN**

- IS685 8<sup>th</sup>-12<sup>th</sup> April & 25-29 April, 2022, O. Tengblad, J Acosta Loza, C. Ferrera González.
- IS659 9<sup>th</sup>-16<sup>th</sup> May, 2022, MJG Borge, O. Tengblad, V. García Távora, D. Fernández Ruiz.
- IS698 19<sup>th</sup> August–29<sup>th</sup> sept., 2022, MJG Borge, O. Tengblad, V. García Távora, D. Fernández Ruiz.
- IS677 21<sup>st</sup>-27<sup>th</sup> July, 2022, C. Ferrera González.

#### **GSI/FAIR Helmholtzzentrum für Schwerionenforschung (Darmstadt, Germany)**

- S522 R3B 16<sup>th</sup>-24<sup>th</sup> May, 2022, O. Tengblad & D. Fernández Ruiz.
- S509 R3B 31<sup>st</sup>-6<sup>th</sup> June, 2022, O. Tengblad & D. Fernández Ruiz.
- S450 DESPEC 14<sup>th</sup>-18<sup>th</sup> February 9<sup>th</sup>-17<sup>th</sup> May, 2022, C. Ferrera González.
- FRS- WASA 05<sup>th</sup> January-04<sup>th</sup> April, 2022, S. Escrig López.
- FRS- WASA 07<sup>th</sup>- 16<sup>th</sup> enero, 2022, C. Rappold.
- FRS- WASA 26<sup>th</sup> January- 05<sup>th</sup> February 2022; C. Rappold.
- FRS- WASA 20<sup>th</sup> February-22<sup>nd</sup> 2022; C. Rappold.

**Laboratory of High Energy Nuclear Physics - RIKEN (Wako, Japan)**

- 25<sup>th</sup> November-21<sup>st</sup> December, 2022, SHARAQ12; C. Ferrera González.

**Aarhus University (Aarhus, Denmark)**

- 29<sup>th</sup> October-6<sup>th</sup> November, 2022, D. Fernández Ruiz.

**4.4.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS****José Luis Doménech Martínez**

- I. Physikalische Institut, Universität zu Köln, Germany. March 30<sup>th</sup>-June 4<sup>th</sup> 2022.
- FELIX (Radboud University), Nijmegen, The Netherlands, July 18<sup>th</sup>-July 22<sup>nd</sup> 2022.
- I. Physikalische Institut, Universität zu Köln, Germany. December 4<sup>th</sup>-December 17<sup>th</sup> 2022.

**4.4.4 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS****Dr. Javier Ramos Díaz**

- Department of Materials Science and Engineering, School of Chemical Engineering, National Technical University of Athens, Athens, Greece, 25<sup>th</sup> of May - 28<sup>th</sup> of October 2022.

## 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

#### Jesús Fernando Barbero González

- *El Siglo de la Física* – Bachelor program in Engineering (humanities course) – National/Official program – Universidad Carlos III (Madrid).  
3rd February-10th of March 2022 – 11 hours.

#### Guillermo A. Mena Marugán

- Tutor *Prácticas Externas Curriculares* - Grado en Física (National Official) - UCM.  
8th March 2022-25th May 2022 - 150 hours. Estudiante: Andrés Minguez Sánchez
- Tutor *Prácticas Externas Curriculares* - Grado en Física (National Official) - UCM.  
8th March 2022-25th May 2022 - 150 hours. Estudiante: Jesús Yébana Carrilero
- Tutor TFM – Máster en Física Teórica (National Official) - UCM.  
18th October 2022-1st June 2023 - 300 hours. Estudiante: Andrés Minguez Sánchez
- Tutor TFM – Máster en Física Teórica (National Official) - UCM.  
18th October 2022-1st June 2023 - 300 hours. Estudiante: Jesús Yébana Carrilero

#### Rafael A. Molina Fernández

- Tutor *Prácticas Externas Curriculares* - Grado en Física (National Official) - UCM.  
24th January 2022-29th March 2022 - 150 hours. Estudiante: Lucía Sanz Martín

#### María Luisa Senent Diez

- Tutora *Prácticas Externas Curriculares* - Grado en Química (National Official) - UAM  
1st August 2022-31st December 2022 - 140 hours. Estudiante: Fernando Mata Rabadán

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

#### María José García Borge

- Tutora *Prácticas Externas Extracurriculares* - Grado en Física (National Official) - UAM.  
4th July 2022-31st July 2022 - 150 hours. Estudiante: Juan Domínguez
- Tutora *Prácticas Externas Curriculares* - Grado en Física (National Official) - UCM.  
8th Sept. 2022-31st July 2023 - 150 hours. Estudiante: Daniel García Patricio

#### Santiago Sánchez Cortés

- Tutor *Prácticas Externas Extracurriculares* - Grado en Ciencias Químicas (National Official) - UCM.  
15th October 2022-15th May 2023 - 605 hours. Laura Pérez López

#### Mª Vega Cañamares Arribas

- *Aplicaciones de la espectroscopía SERS al estudio de colorantes artísticos.* Ciclo de Conferencias: Retos Actuales en Investigación en Química 2022, Actividades Formativas Específicas del Programa de Doctorado en Química, Ph.D.- National Official, Facultad de Ciencias Experimentales, Universidad de Jaén, Jaén, Spain, 20th May 2022.

### 5.1.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS

#### María Belén Maté Naya

- *Espectroscopía infrarroja y espectrometría de masas como técnicas de estudio de la interacción de moléculas con superficies-* Curso “Caracterización químico-física de la superficie de adsorbentes y catalizadores- Curso de Postgrado (Nacional), Jarandilla de la Vera, Residencia V Centenario de la Universidad de Extremadura - Grupo Especializado de Adsorción de la RRSSEE de Química y Física y CSIC.  
8th June 2022. 1,5 hours

#### Vicente Timón Salinero

- Tutor *Prácticas Externas Curriculares* - Grado en Física (National Official) - UCM.  
7th January 2022-29th April 2022 - 150 hours. Estudiante: Gema Wang

- Tutor *Prácticas Externas* – Grado en Física (National Official) - UCM.  
31th January 2022-6th April 2022 - 150 hours. Estudiante: Lucía Cortijo Gamboa
- Tutor *Prácticas Externas* – Grado en Química (National Official) – UMU.  
11th July 2022-10th August 2022 - 180 hours. Estudiante: José Antonio Quiñonero Gris

#### **5.1.4 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS**

##### **Fco. Javier Ramos Díaz**

- Asignatura de Simulación Molecular - Máster en Alta Especialización en Plásticos y Cauchos – Internacional - Universidad Internacional Menéndez Pelayo - Consejo Superior de Investigaciones Científicas. 22th of February-1st April 2022 – 14 hours
- Tutor *TFM* – Máster en Ingeniería Industrial (National Official) - UPM  
1st February 2022-1st Sept. 2022 - 300 hours. Estudiante: Samuel del Pulgar Balaña

##### **Juan Francisco Vega Borrego**

- Tutor *Prácticas Externas Curriculares* - Grado en Química (National Official) – Universidad de Alcalá.  
7th February 2022-6th June 2022 - 430 hours. Estudiante: Emma Franco Mateos
- Asignatura de Reología (Profesor Responsable) - Máster en Alta Especialización en Plásticos y Cauchos – Internacional - Universidad Internacional Menéndez Pelayo - Consejo Superior de Investigaciones Científicas.  
13th February-4th March 2022 – 12 hours.

### **5.2 CURSOS, CONFERENCIAS Y SEMINARIOS**

*COURSES, CONFERENCES AND SEMINARS*

#### **5.2.1 DPTO. DE QUÍMICA Y FÍSICA TEÓRICAS / THEORETICAL PHYSICS AND CHEMISTRY**

##### **Guillermo Antonio Mena Marugán**

- *Reflections on Loop Quantum Cosmology*, Invited panelist in the *International Loop Quantum Gravity Seminars* (online conference series), 17<sup>th</sup> of May 2022.

##### **José González Carmona**

- *El grafeno como modelo de fermiones relativistas*, XVIII Curso de Iniciación a la Investigación, IEM, CSIC, Madrid, 7<sup>th</sup> of April 2022.

##### **Jesús Fernando Barbero González**

- *Consistent and non-consistent deformations of gravitational theories*. ICMAT (Madrid). Geometry, Mechanics and Control Seminar 6<sup>th</sup> of May 2022.

##### **Gianluca Calcagni**

- *Cosmología, ondas gravitacionales y gravedad cuántica*. XVIII Curso de Iniciación a la Investigación, IEM, CSIC, Madrid, 5<sup>th</sup>-7<sup>th</sup> of April 2022.

##### **Rafael A. Molina Fernández**

- *From integrability to chaos in Quantum Liouvillians*, Facultad de Ciencias Físicas, UCM, 21<sup>st</sup> of October 2022.
- *From integrability to chaos in Quantum Liouvillians*, Universität Regensburg, 27<sup>th</sup> of October 2022.

##### **Ángel López Corps**

- *Caos, termalización y aplicaciones a las tecnologías cuánticas*, XVIII Curso de Iniciación a la Investigación, IEM, CSIC, Madrid, 5<sup>th</sup>-7<sup>th</sup> of April 2022.

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

### **María José García Borge**

- *Euroschool on Exotic Beams*, La Rabida (Huelva) 11<sup>th</sup>-17<sup>th</sup> of September 2022 “Beta decay”, 4 lectures
- *Estudio de núcleos exóticos*. Part of the “XVIII Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia”, IEM, CSIC, Madrid, 5<sup>th</sup>-7<sup>th</sup> of April 2022.

### **José Antonio Sánchez Gil**

- *Nanofotónica y metamateriales con nanoestructuras metálicas y semiconductoras*. Part of the “XVIII Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia”, IEM, CSIC, Madrid, 5<sup>th</sup>-7<sup>th</sup> of April 2022.

### **Sagrario Martínez Ramírez y Ana Crespo Ibáñez**

- *Técnicas espectroscópicas aplicadas al estudio del Patrimonio Histórico-Artístico*. Part of the “XVIII Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia”, IEM, CSIC, Madrid, 5<sup>th</sup>-7<sup>th</sup> of April 2022.

### **M<sup>a</sup> Vega Cañamares Arribas**

- *Espectroscopía Raman Intensificada por Superficies: SERS*. Part of the “XVIII Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia”, IEM, CSIC, Madrid, 5<sup>th</sup>-7<sup>th</sup> of April 2022.
- Aplicación de la espectroscopía SERS al estudio del Patrimonio. Seminario Patrimonio Abierto: Investigación y Sociedad. Universidad Internacional Menéndez Pelayo, Madrid, 7<sup>th</sup> of October 2022.

### **Ricardo Fernández Perea**

- *La física de la materia desordenada*, part of the “XVIII Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia”, IEM, CSIC, 5<sup>th</sup>-7<sup>th</sup> of April 2022.

### **Vincenzo Giannini**

- *Metamateriales topológicos*. Part of the “XVIII Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia”, IEM, CSIC, Madrid, 5<sup>th</sup>-7<sup>th</sup> of April 2022.

### **Christophe Rappold**

- *Machine Learning en el programa de Física Nuclear en GSI-FAIR*. Part of the “XVIII Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia”, IEM, CSIC, Madrid, 5<sup>th</sup>-7<sup>th</sup> of April 2022.

## **5.2.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS**

### **José Luis Doménech Martínez**

- *High Resolution Infrared Spectroscopy of Ions of Astrophysical Interest Spring term SFB 956 Colloquia*, May 30<sup>th</sup> 2022, I. Physikalisches Institut, Cologne, Germany.

### **José María Fernández**

- *Espectroscopía: una potente herramienta para conocer el Universo*. Conferencia a estudiantes de Bachillerato, Catálogo de Conferencias Científicas del CSIC dirigidas al Sistema Educativo de la Comunidad de Madrid, IES Altair de Getafe (Madrid), 19<sup>th</sup> of January 2022
- *Spectroscopy and inelastic collisions of atmospheric molecules*. ATMOS2022 International winter school on atmospheric chemistry greenhouse gasses and pollutants. (International), Rabat (Morocco, 21<sup>th</sup>-25<sup>th</sup> of February 2022).
- *Espectroscopía de microchorros: gases y líquidos fuera del equilibrio*. Part of the “XVIII Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia”, IEM, CSIC, Madrid, 5<sup>th</sup> -7<sup>th</sup> of April 2022.
- *Visit to the Laboratory of Molecular Fluid Dynamics*. Part of “XVIII Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia”, IEM, CSIC, Madrid, 5<sup>th</sup> -7<sup>th</sup> of April 2022.

### **Belén Maté Naya**

- *Hielos astrofísicos*. Part of the “XVIII Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia”, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 5<sup>th</sup> -7<sup>th</sup> of April 2022.

**Ramón Peláez Fuentes**

- Codirector del “XVIII Curso de iniciación a la investigación en estructura de la materia: de las partículas elementales a los sistemas de alto peso molecular”, IEM, CSIC, Madrid, Spain, 5<sup>th</sup>-7<sup>th</sup> of April 2022.
- *Plasmas a baja temperature*. Part of the “XVIII Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia”, IEM, CSIC, 5<sup>th</sup>-7<sup>th</sup> of April 2022.

**Guzmán Tejeda Gala**

- Codirector del “XVIII Curso de iniciación a la investigación en estructura de la materia: de las partículas elementales a los sistemas de alto peso molecular”, IEM, CSIC, Madrid, Spain, 5<sup>th</sup>-7<sup>th</sup> of April 2022.
- *Visit to the Laboratory of Molecular Fluid Dynamics*. Part of “XVI Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia”, IEM, CSIC, Madrid, 5<sup>th</sup>-7<sup>th</sup> of April 2020.

**Vicente Timón Salinero**

- *La simulación computacional atomística en físico-química de materiales*. Part of “XVIII Curso de iniciación a la investigación en estructura de la materia: de las partículas elementales a los sistemas de alto peso molecular”, IEM, CSIC, Madrid, Spain, 5<sup>th</sup>-7<sup>th</sup> of April 2022.

**5.2.4 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS****Mari Cruz García Gutiérrez**

- *El uso de Grandes Instalaciones Científicas en la investigación de la Materia Condensada Blanda*. Part of “XVIII Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia: de las partículas elementales a los sistemas de alto peso molecular”, IEM, CSIC, Madrid 5<sup>th</sup>-7<sup>th</sup> of April 2022.

**Aurora Nogales Ruiz**

- Polymer Nanoparticles: Physical Properties and possible applications. Instituto de Ciencia de Materiales de Barcelona, ICMAB, CSIC. 16<sup>th</sup> of December 2022.

**Fco. Javier Ramos Díaz**

- *Simulación multiescalar para el diseño de plásticos reciclables*. Part of “XVIII Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia: de las partículas elementales a los sistemas de alto peso molecular”, IEM, CSIC, Madrid 5<sup>th</sup>-7<sup>th</sup> of April 2022.

**Juan Francisco Vega Borrego**

- *Física macromolecular en el ecodiseño de materiales poliméricos*. Part of “XVIII Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia: de las partículas elementales a los sistemas de alto peso molecular”, IEM, CSIC, Madrid 5<sup>th</sup>-7<sup>th</sup> of April 2022.
- *Assessing the molecular architecture of polyolefins: coupling the synthesis with the rheological properties*, TotalEnergies One Tech, Seneffe, Belgium, 10<sup>th</sup> of October 2022.
- *Eco-design of commodity polymers for packaging: Experiments and computer simulations*, Computational Materials Science and Engineering Group, Department of Materials Science and Engineering, School of Chemical Engineering, National Technical University, Athens, Greece, 13<sup>th</sup> of October 2022.
- *Lágrimas para la microrreología*, Delegación de Química de la Universidad de Alcalá de Henares - Semana de la Ciencia – Mes de la Química 2022, 30<sup>th</sup> of November 2022.

**5.3 PREMIOS Y OTROS MÉRITOS****AWARDS****5.3.1 DPTO. DE QUÍMICA Y FÍSICA TEÓRICAS / THEORETICAL PHYSICS AND CHEMISTRY****Guillermo Antonio Mena Marugán**

- Editor of *Frontiers in Astronomy and Space Sciences* as Review Editor in Cosmology.
- Member of the Editorial Board of the journal *Universe*.
- External Member for the Quality Committee of the Doctorate Program in Physics of the Universidad Complutense de Madrid.

**Jesús Fernando Barbero González**

- Elected President of the Sociedad Española de Gravitación y Relatividad (SEGRE).
- Member of the Local and Scientific Advisory Committees of the *XXX International Fall Workshop on Geometry and Physics*, Madrid (Spain).
- Associate Editor for *General Relativity and Gravitation* (Springer-Nature).
- Associate Editor for the *Journal of Geometry and Mechanics* (American Institute of Mathematical Sciences).

**Eduardo Garrido Bellido**

- Member of the Scientific and Local Organizing Committee of the *European Nuclear Physics Conference 2022*, Santiago de Compostela (Spain).

**María Luisa Senent Diez**

- Member of the Scientific Advisory Committee of the International Conference *International Symposium on Molecular Spectroscopy*. Urbana-Champaign Illinois (USA).

**Gianluca Calcagni**

- Field Chief Editor of *Frontiers in Astronomy and Space Sciences*.
- Member of the LISA Membership Management Team.
- Member of the LISA Internal Networking Committee for Science.

**Rafael Alejandro Molina Fernández**

- Member of the Scientific and Local Organizing Committees of the *Cold Atom Workshop 2022*, Madrid, (Spain).

**5.3.2 DPTO. DE ESPECTROSCOPÍA NUCLEAR, VIBRACIONAL Y DE MEDIOS DESORDENADOS / NUCLEAR, VIBRATIONAL AND DISORDERED MEDIA SPECTROSCOPY****Mª Vega Cañamares Arribas**

- Member of the Scientific and Local Organizing Committees of the XXVII Reunión Nacional de Espectroscopía – XI Congreso Ibérico de Espectroscopía, Málaga (Spain)
- MPDI Chemosensors Guest Editor.

**José A. Sánchez Gil**

- Optica *Optics Express* Associate Editor.
- MDPI *Nanomaterials* Review Editor.

**5.3.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS****Víctor José Herrero Ruiz de Loizaga**

- Spanish representative in the *Plasma Science and Technology Division of the International Union for Vacuum Science, Technique and Applications (IUVSTA)*.
- Member of the *Scientific Advisory Committee of the Europhysics Conferences on Atomic and Molecular Processes in Ionized Gases (ESCAMPIG)*.

**Isabel Tanarro Onrubia**

- Member of the board of the “*Grupo Especializado de Física de Plasmas*” of the Real Sociedad Española de Física (Spain).

**Belén Maté Naya**

- Member of the organizing committee of the XXVII RNE-XI CIE, celebrado en Málaga, July 2022.

**José M. Fernández Sánchez**

- Member of the International Advisory Committee of *International Symposium on Rarefied Gas Dynamics*.

**Calos Álvarez Nicolás**

- Best contribution award of I Jornada de Investigadores Noveles del IEM, October 2022.

### **5.3.4 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS**

#### **Mari Cruz García Gutiérrez**

- Spanish Delegate of the European Synchrotron Radiation Facility Council, since September 2014.
- Member of the Scientific Advisory Committee of the *XAUSe Congress & VALBA User Meeting*, Barcelona (Spain).
- Member of the Committee “SIMPLIFICA CSIC”.

#### **Juan Francisco Vega Borrego.**

- Member of the Scientific Advisory Committee of the *European Reology Conference 2022*, Sevilla (Spain).
- Guest Editor of the Special Issue "Rheology Applied to Polymer Characterization and Processing: A Themed Honorary Issue to Prof. Antxon Santamaría". A Special issue of *Polymers* (ISSN 2073-4360), 2022. This special issue belongs to the section "Polymer Processing and Engineering".

## **5.4 ACTIVIDADES Y MATERIAL DE DIVULGACIÓN OUTREACH ACTIVITIES AND MATERIAL**

### **5.4.1 DPTO. DE QUÍMICA Y FÍSICA TEÓRICAS / THEORETICAL PHYSICS AND CHEMISTRY**

#### **Guillermo Antonio Mena Marugán**

- Series of online outreach seminars “Café con”. Collaboration with the Real Sociedad Económica Extremeña de Amigos del País in the organization of the following seminars in the series (and participation in the fourth of them):

- Juan J. Ruiz-Lorenzo, Universidad de Extremadura, *Sistemas complejos muy complejos: un viaje por la ciencia de Giorgio Parisi* (<https://www.youtube.com/watch?v=5rALcgsWgfQ>), Main Lecture Hall of the RSEEA in Badajoz and online, 19<sup>th</sup> of November 2022.
  - Benjamín Montesinos Comino, CAB, INTA-CSIC, *El sol, un gran desconocido* (<https://www.youtube.com/watch?v=PIXqccbtN5I>), 8<sup>th</sup> of June 2022.
  - Ignacio Martín-Fabiani, Loughborough University, UK, *Pintura para un mundo mejor: nuestra guerra contra las bacterias* (<https://www.youtube.com/watch?v=5F7FNEwU-j0>), 16<sup>th</sup> of March 2022.
  - Alicia Sintes Olives, Universitat de les Illes Balears, *Ondas gravitacionales, nuevas mensajeras del Universo* (<https://www.youtube.com/watch?v=kouYEdmtfQA>), 16<sup>th</sup> of February 2022.
  - Vincenzo Giannini, IEM-CSIC, *Hacia ordenadores que usan la luz en vez de la electricidad* (<https://www.youtube.com/watch?v=D3UC1KIveUg>), 26<sup>th</sup> of January 2022.
- Online seminars, recorded and available at  
<https://www.facebook.com/conoce.cafecon/>  
<https://www.youtube.com/@realsociedaddeconomicaamigo4039streams>

#### **Jesús Fernando Barbero González**

- *Base 2, base3..., base n: curiosidades de los sistemas de numeración.*  
Conferencia. XXII Semana de la Ciencia y la Tecnología-CSIC-CAM  
IEM. Madrid.  
14<sup>th</sup> of November 2022
- *Preludio Matemático a la Relatividad: geometría parfa las masas.*  
Conferencia. XXII Semana de la Ciencia y la Tecnología-CSIC-CAM  
IEM. Madrid.  
14<sup>th</sup> of November 2022
- *Base 2, base3..., base n: curiosidades de los sistemas de numeración.*  
Conferencia. Seminario de Navidad  
IEM, CSIC, Madrid.  
20<sup>th</sup> of December 2022

- *Del Cosmos al nano... y más allá.*  
Escape room para estudiantes entre 14 y 16 años.  
Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, Madrid.  
25<sup>th</sup> of March of 2022  
11<sup>th</sup> and 18<sup>th</sup> of November 2022 (XXII Semana de la Ciencia y la Tecnología)

**María Luisa Senent Diez**

- *Open Doors session.*  
Journée de Sensibilisation. Pollution Atmospheric et Changement Climatique of the Atmos Winter School.  
Rabat (Morocco).  
25<sup>th</sup> of February 2022

**Gianluca Calcagni**

- *La Tierra es plana: Gravedad cuántica para todos.*  
Conferencia series "Ciencia en Primera Persona".  
MUNCYT, Alcobendas.  
8<sup>th</sup> of May 2022

**Rafael A. Molina Fernández**

- *Tecnologías cuánticas: promesas y realidades.*  
Conferencia. XXII Semana de la Ciencia y la Tecnología-CSIC-CAM  
IEM. Madrid.  
15<sup>th</sup> of November 2022
- *Del Cosmos al nano... y más allá.*  
Escape room para estudiantes entre 14 y 16 años.  
Instituto de Estructura de la Materia CSIC, Madrid.  
25<sup>th</sup> of March of 2022  
11<sup>st</sup> and 18<sup>th</sup> of November 2022 (XXII Semana de la Ciencia y la Tecnología)

**5.4.2 DPTO. DE ESPECTROSCOPIA NUCLEAR, VIBRACIONAL Y DE MEDIOS DESORDENADOS / NUCLEAR, VIBRATIONAL AND DISORDERED MEDIA SPECTROSCOPY****Vincenzo Giannini**

- *Hacia ordenadores que usan la luz en vez de la electricidad.*  
Series of online outreach seminars "Café con".  
26<sup>th</sup> of January 2022

**Sagrario Martínez Ramírez / Jessica Roldán Coronel**

- Día Internacional de la Mujer y la Niña en la Ciencia – 11 de febrero.  
Charla: *Grandes científicas en la historia: Rosalind Franklin, Sagrario Ramirez Gallardo, Rita Levi-Montalcini, Mme Lavoisier, Mildred Dresselhaus. Las mujeres científicas hoy. ¿Que dicen las encuestas sobre las carreras que escogen chicos y chicas? ¿Te atreves a ser científica?*  
IES Palomeras – 3 of February 2022  
IES Las Rosas – 8<sup>th</sup> of February 2022  
IES Joaquín Turina – 9<sup>th</sup> of February 2022  
IES Cervantes - 10<sup>th</sup> of February 2022  
IES Vicente Aleixandre - 11<sup>th</sup> of February 2022  
IES Dámaso Alonso - 17<sup>th</sup> of February 2022
- *Del Cosmos al nano... y más allá.*  
Escape room para estudiantes entre 14 y 16 años.  
Instituto de Estructura de la Materia CSIC, Madrid.  
25<sup>th</sup> of March of 2022  
11<sup>st</sup> and 18<sup>th</sup> of November 2022 (XXII Semana de la Ciencia y la Tecnología)

### **5.4.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS**

#### **Ángel González Valdenebro**

- *El experimento más bonito de la Física: la doble rendija de Young y los misterios de la mecánica cuántica”.*  
Conferencia. XXII Semana de la Ciencia y la Tecnología-CSIC-CAM  
Instituto de Estructura de la Materia CSIC, Madrid.  
15<sup>th</sup> of November 2022.

#### **Guzmán Tejeda Gala / Vicente Timón Salinero / Ramón Peláez Fuentes / Ángel González Valdenebro**

- *Volamos y Levitamos* (Taller de experimentos caseros en colegios e institutos).  
XXII Semana de la Ciencia y la Tecnología-CSIC-CAM.  
CEIP Pedro Brimonis – 7<sup>th</sup> of November  
Colegio Nuestra Señora del Recuerdo - 10<sup>th</sup> of November 2022  
CEIP Leopoldo Calvo Sotelo - 14<sup>th</sup> of November 2022  
CEIP Ramón y Cajal - 15<sup>th</sup> of November 2022  
IES Emilio Castelar - 21<sup>th</sup> of November 2022  
IES Juan de la Cierva - 22<sup>th</sup> of November 2022  
IES Eijo y Garay - 12<sup>th</sup> of December 2022

#### **Guzmán Tejeda Gala, Belén Maté Naya / Vicente Timón Salinero**

- *Del Cosmos al nano... y más allá.* (Escape room para estudiantes entre 14 y 16 años).  
Instituto de Estructura de la Materia CSIC, Madrid.  
25<sup>th</sup> of March of 2022  
11<sup>st</sup> and 18<sup>th</sup> of November 2022 (XXII Semana de la Ciencia y la Tecnología)

#### **Vicente Timón Salinero**

- *LOCUCIENCIA*  
Programa de ciencia semanal en Radio Almenara 107.6 FM  
<http://www.radioalmenara.net/spip.php?rubrique117>  
During all 2022

### **5.4.4 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS**

#### **Tiberio Ezquerro Sanz**

- Scientific theater – TeatrIEM.  
Actor in “*Para Siempre: Apuntes teloméricos variados*”.  
- 27<sup>th</sup> of February 2022. Residencia de Estudiantes (Madrid)  
- 25<sup>th</sup> of March 2022. Centro Cultural Viñagrande (Alcorcón)
- Scientific theater – TeatrIEM.  
Actor in “*Cifras y Ciencias*”  
XXII Semana de la Ciencia y la Tecnología.  
- 26 of November 2022. Casa de la Cultura de Navacerrada (Madrid)  
- 17<sup>th</sup>, 18<sup>th</sup> and 19<sup>th</sup> of November 2022. Museo Nacional de Ciencias Naturales (Madrid)

#### **Mari Cruz García Gutiérrez**

- Scientific theater – TeatrIEM.  
Actress and assistant director in “*Para Siempre: Apuntes teloméricos variados*”.  
- 27<sup>th</sup> of February 2022. Residencia de Estudiantes (Madrid)  
- 25<sup>th</sup> of March 2022. Centro Cultural Viñagrande (Alcorcón)
- Scientific theater – TeatrIEM.  
Actress in “*Cifras y Ciencias*”  
XXII Semana de la Ciencia y la Tecnología.  
- 26 of November 2022. Casa de la Cultura de Navacerrada (Madrid)  
- 17<sup>th</sup>, 18<sup>th</sup> and 19<sup>th</sup> of November 2022. Museo Nacional de Ciencias Naturales (Madrid)
- Member of the jury of the II TeatrIEM cotest of short theatrical texts with a scientific subject
- Organizer of the III TeatrIEM cotest of short theatrical texts with a scientific subject
- 4<sup>º</sup>ESO+Empresa de la Comunidad de Madrid program. Tutor of 12 students from IES Satafi Getafe, IES Joaquín Rodrigo, Colegio Sagrado Corazón e IES Ramiro de Maeztu during the stay at the IEM.

**Aurora Nogales Ruiz**

- Día Internacional de la Mujer y la Niña en la Ciencia – 11 de febrero.  
*Grandes científicas en la historia: Rosalind Franklin, Sagrario Ramirez Gallardo, Rita Levi-Montalcini, Mme Lavoisier, Mildred Dresselhaus. Las mujeres científicas hoy. ¿Que dicen las encuestas sobre las carreras que escogen chicos y chicas? ¿Te atreves a ser científica?*  
IES Palomeras – 3 of February 2022  
IES Las Rosas – 8<sup>th</sup> of February 2022  
IES Joaquín Turina – 9<sup>th</sup> of February 2022  
IES Cervantes - 10<sup>th</sup> of February 2022  
IES Vicente Aleixandre - 11<sup>th</sup> of February 2022  
IES Dámaso Alonso - 17<sup>th</sup> of February 2022
- Organizing committee: *Del Cosmos al nano... y más allá.* (Escape room para estudiantes entre 14 y 16 años). Instituto de Estructura de la Materia CSIC, Madrid.  
25<sup>th</sup> of March of 2022  
11<sup>st</sup> and 18<sup>th</sup> of November 2022 (XXII Semana de la Ciencia y la Tecnología)
- Conferencia: '*Fabricando y Observando Nanestructuras en el Laboratorio*' 13th-May-2022, Colegio Vedruna-Carabanchel. Included in the 'Catálogo de Conferencias Científicas del CSIC dirigidas al Sistema Educativo de la Comunidad de Madrid'.
- Organizing committee 'Coloquios Marie Curie':  
- 26<sup>th</sup> May 2022 Julián Casanova. '*Una introducción al siglo XX europeo*' CSIC Central Conference Room.  
- 25<sup>th</sup> October 2022. Joanna Haigh. '*The Science of Climate Change*' CSIC Central Conference Room.  
- 15<sup>th</sup> of December 2022. Pedro Miguel Echenique Landiribar '*La sublime utilidad de la ciencia inútil*' CSIC Central Conference Room.
- 4ºESO+Empresa. Comunidad de Madrid program. Tutor of 12 students from IES Satafi Getafe, IES Joaquín Rodrigo, Colegio Sagrado Corazón e IES Ramiro de Maeztu during the stay at the IEM.

**Fco. Javier Ramos Díaz**

Proyecto de docencia en colaboración con la UAH “Visualiza la simetría”. 28<sup>th</sup> of september 2022.

<http://symmetryuh.epizy.com/>

[https://www.youtube.com/watch?v=P4cvjyKQ0\\_4](https://www.youtube.com/watch?v=P4cvjyKQ0_4)

## 5.5 TRANSFERENCIA DE TECNOLOGÍA TRANSFER OF TECHNOLOGY

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

#### ➤ REUNIONES DE TRANSFERENCIA DE TECNOLOGÍA

*Meeting attendees:* Santiago Sánchez Cortés.

*Collaboration:* **Saftra Photonics Ltd.**

*Place:* Videoconference.

*Date:* During all the 2022 year, once a week.

#### ➤ MIEMBROS DE COMITÉS CIENTÍFICOS ASESORES

*Member:* Santiago Sánchez Cortés.

*Collaboration:* **Regulaxis SAS Company.**

*Place:* Technological Park in Paris, France.

*Date:* 2022

*Member:* Santiago Sánchez Cortés.

*Collaboration:* **Saftra Photonics Ltd.**

*Place:* Technological Innovation Park in Kosice (Slovakia).

*Date:* 2022

**María José García Borge**

- Coordinator of *Nuclear and Particle Physics* Subarea of the Spanish Research Agency.
- Member of the Scientific Advisory Committee of joint GSI / Fair (Darmstadt, Alemania) 2016-2022.
- Member of the P2 Panel of *ERC Advance Grants*, October 2022 - February 2023.
- Member of the Subatech (Nantes, France) International Scientific Council 2019-
- Member of the LNS, (Catania, Italy) Proposal advisory Committee 2020-
- Member of the program advisory Committee (PAC) for the Facility for Rare Isotopes Beam (East Lansing, USA) 2021-
- Chair of the *Program Advisory Committee for Nuclear Physics Experiments* at RIKEN (Tokio, Japan) RI Beam Factory (NP-PAC), 2019-2022.
- Member of the C12 of IUPAP (vicechair), 2019-2023.

**Olof Tengblad**

- Member of the *Scientific Comittee* of the Canfranc Laboratory LSC. 2019-
- Technical *Director of the R3B collaboration*, GSI / Fair. 2014-
- Member of the *ERNCIP TG Radiological and Nuclear Threats to Critical Infrastructure*, European Comission 2016-

**5.5.2 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS****➤ REUNIONES DE TRANSFERENCIA DE TECNOLOGÍA**

Título de la reunión: PE characterization topics.

Meeting attendees: J.F. Vega, A. Cardil, S. Garrepally, A. Sigwald and O. L'host

Collaboration: Total RC/R&D Polymers.

Place: Madrid (Spain) and Seneffe (Belgium).

23<sup>th</sup>-25<sup>th</sup> of May, 10<sup>th</sup> – 11<sup>th</sup> of October 2022.

**➤ INFORMES DE TRANSFERENCIA TECNOLÓGICA****Juan Francisco Vega Borrego and Andrés Cardil Tornos**

*On the effect of long chain branching on rheological properties of polyethylenes.*

**Total SE and TotalEnergies**

March, June and November 2022.

**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:**

- *Group of Field Theory and Statistical Physics. Instituto Universitario Gregorio Millán Barbany*, University of Carlos III of Madrid.  
Responsible: Eduardo Jesús Sánchez Villaseñor.  
Members of the IEM participating in this Associated Unit:  
**Jesús Fernando Barbero González** (responsible) and José González Carmona.
- *Research group in Molecular, Atomic and Nuclear Physics (GIFMAN)*, University of Huelva.  
Responsible: Miguel Carvajal Zaera.  
Members of the IEM participating in this Associated Unit:  
**María Luisa Senent Diez** (responsible), J. Dukelsky, J.M. Fernández, G. Tejeda, M.J. García Borge and O. Tengblad.

**María Luisa Senent Diez**

- Member participating in Associated Unit *Department of Physical Chemistry I*, University Complutense of Madrid.

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

### **Unidades Asociadas / Associated Units:**

#### **M<sup>a</sup> José Gacía Borge and Olof Tengblad**

- Members participating in Associated Unit *group in Molecular, Atomic and Nuclear Physics (GIFMAN)*, University of Huelva.

### **Otras actividades / Other activities:**

- T. R. Saito y **C. Rappold** han formalizado la colaboración entre instituto IEM-CSIC y el laboratorio HENP-RIKEN mediante la firma de un Memorandum of Understanding / Protocolo General de Actuación el 31 de agosto de 2022 para el estudio de la hipermateria.

## **5.6.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS**

### **Unidades Asociadas / Associated Units:**

- *Department of Physical Chemistry I*, University Complutense of Madrid.  
Comprising IEM-CSIC, IQFR-CSIC, IFF-CSIC and Department Química Física I-UCM.  
Responsible: Javier Aoiz Moleres.  
Members of the IEM participating in this Associated Unit:  
**Víctor J. Herrero Ruiz de Loizaga** (responsible), J.L. Doménech Martínez, J.M. Fernández Sánchez, M.L. Senent Diez, I. Tanarro Onrubia, B. Maté Naya and J. Ortigoso Martínez.

#### **José M. Fernández Sánchez and Guzmán Tejeda Gala**

- Members participating in Associated Unit *group in Molecular, Atomic and Nuclear Physics (GIFMAN)*, University of Huelva.

## **5.6.4 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS**

### **Unidades Asociadas / Associated Units:**

- *Física de Sistemas Crecidos con Baja Dimensionalidad*, Universidad Autónoma de Madrid.  
Responsible: Jesús Álvarez Alonso.  
Members of the IEM participating in this Associated Unit:  
**María José Capitán Aranda** (responsible).

### **Otras actividades / Other activities:**

#### **Tiberio A. Ezquerra Sanz**

- Measurements in ALBA Synchrotron, (NCD beamline). Barcelona, Spain, 4-6<sup>th</sup> May 2022
- Measurements in ALBA Synchrotron, (NCD beamline). Barcelona, Spain, 14-17<sup>th</sup> December 2022

#### **Mari Cruz García Gutiérrez**

- Measurements in ALBA Synchrotron, (NCD beamline). Barcelona, Spain, 16-17<sup>th</sup> June 2022

#### **Aurora Nogales Ruiz**

- Measurements in ALBA Synchrotron, (NCD beamline). Barcelona, Spain, 4-6<sup>th</sup> May 2022
- Measurements in ALBA Synchrotron, (NCD beamline). Barcelona, Spain, 16-17<sup>th</sup> June 2022
- Measurements in ALBA Synchrotron, (NCD beamline). Barcelona, Spain, 14-17<sup>th</sup> December 2022

#### **Patricia Martínez García**

- Measurements in ALBA Synchrotron, (NCD beamline). Barcelona, Spain, 4-6<sup>th</sup> May 2022

#### **José Sena Fernández**

- Measurements in ALBA Synchrotron, (NCD beamline). Barcelona, Spain, 16-17<sup>th</sup> June 2022
- Measurements in ALBA Synchrotron, (NCD beamline). Barcelona, Spain, 14-17<sup>th</sup> December 2022

## 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. Addazi *et al.* (including G. Calcagni).  
*Quantum gravity phenomenology at the dawn of the multi-messenger era - A review.*  
 Progress in Particle and Nuclear Physics **125**, 103948 (2022).
2. K.G. Arun *et al.* (including G. Calcagni) [LISA Fundamental Physics Working Group].  
*New horizons for fundamental physics with LISA.*  
 Living Reviews in Relativity **25**, 4 (2022).
3. Y. Baba, M. Amado, E. Diez, F. Domínguez-Adame and R.A. Molina.  
*Effect of external fields in high Chern number quantum anomalous Hall insulators.*  
 Physical Review B **106**, 245305 (2022).
4. T. Baker *et al.* (including G. Calcagni) [LISA Cosmology Working Group].  
*Measuring the propagation speed of gravitational waves with LISA.*  
 Journal of Cosmology and Astroparticle Physics **08** (2022) 031.
5. J. Fernando Barbero G., Juan Margalef-Bentabol, Valle Varo and Eduardo J. S. Villaseñor.  
*On the on-shell equivalence of General Relativity and Holst theories with nonmetricity, torsion and boundaries.*  
 Physical Review D **105**, 064066 (2022).
6. J. Fernando Barbero G., Marc Basquens, Bogar Díaz and Eduardo J. S. Villaseñor.  
*Consistent and non-consistent deformations of gravitational theories.*  
 Journal of High Energy Physics **05**, 175(2022).
7. J. Fernando Barbero G., Bogar Díaz, Juan Margalef-Bentabol and Eduardo J. S. Villaseñor.  
*Edge observables of the Maxwell-Chern-Simons theory.*  
 Physical Review D **106**, 025011 (2022).
8. J. Fernando Barbero G., Marc Basquens, Bogar Díaz and Eduardo J. S. Villaseñor.  
*Poisson brackets in Sobolev spaces: a mock holonomy-flux algebra.*  
 Physica Scripta **97**, 125202 (2022).
9. G. Calcagni and G.U. Varieschi.  
*Gravitational potential and galaxy rotation curves in multi-fractional spacetimes.*  
 Journal of High Energy Physics **08** (2022) 024.
10. E. R. Christensen, E. Garrido and A.S. Jensen.  
*Two-body continuum states in noninteger geometry.*  
 Physical Review A **105**, 033308 (2022).
11. A. Corps, R.A. Molina and A. Relaño.  
*Chaos in a deformed Dicke model.*  
 Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical **55**, 084001 (2022).
12. A.L. Corps and A. Relaño.  
*Comment on 'Revisiting the phase transitions of the Dicke model'.*  
 Physical Review A **106**, 047701 (2022).
13. A.L. Corps and A. Relaño.  
*Dynamical and excited-state quantum phase transitions in collective systems.*  
 Physical Review B **106**, 024311 (2022).

14. A.L. Corps and A. Relaño.  
*Energy cat states induced by a parity-breaking excited-state quantum phase transition.*  
Physical Review A **105**, 052204 (2022).
15. Díaz, B.; González, D.; Gutiérrez-Ruiz, D.; Vergara, J.D.  
*Classical analogs of the covariance matrix, purity, linear entropy, and von Neumann entropy.*  
Physical Review A **105**, 062412 (2022).
16. B. Elizaga Navascués and G.A. Mena Marugán.  
*Quantization ambiguities and the robustness of effective descriptions of primordial perturbations in hybrid loop quantum cosmology.*  
Classical Quantum Gravity **39**, 015017 (2022).
17. Elizaga Navascués, B.; Mena Marugán, G.A.; Vidotto, F.  
*Editorial: Loop Quantum Cosmology*  
Frontiers in Astronomy and Space Sciences **9**, 845459 (2022).
18. B. Elizaga Navascués, A. García-Quismondo and G.A. Mena Marugán.  
*Space of solutions of the Ashtekar-Olmedo-Singh effective black hole model.*  
Physical Review D **106**, 063516 (2022).
19. B. Elizaga Navascués, A. García-Quismondo and G.A. Mena Marugán.  
*Hamiltonian formulation and loop quantization of a recent extension of the Kruskal spacetime.*  
Physical Review D **106**, 043531 (2022).
20. A. García-Quismondo and G.A. Mena Marugán.  
Two-time alternative to the Ashtekar-Olmedo-Singh black hole interior.  
Physical Review D **106**, 023532 (2022).
21. E. Garrido, E. R. Christensen and A.S. Jensen.  
*Three-body continuum states and Efimov physics in noninteger geometry.*  
Physical Review A **106**, 013307 (2022).
22. S. Iteanu and G.A. Mena Marugán.  
*Mass of cosmological perturbations in the hybrid and dressed metric formalisms of loop quantum cosmology for the Starobinsky and exponential potentials.*  
Universe **08**, 463 (2022).
23. M. Mogren Al-Mogren, D. Ben Abdallah, S. Alharbi and M.L. Senent.  
*Collision excitation of c-C<sub>3</sub>H(X<sup>1</sup>A<sub>1</sub>) by He.*  
Journal of Chemical Physics **156**, 184302 (2022).
24. O. Moreno, P. Sarriguren, A. Algora, L.M. Fraile, and S.E.A. Orrigo.  
*Bulk and decay properties of neutron-deficient odd-mass Hg isotopes near A = 185.*  
Physical Review C **106**, 034317 (2022).
25. A. Rubio-García, A.L. Corps, A. Relaño, R.A. Molina, F. Pérez-Bernal, J.E. García-Ramos and J. Dukelsky.  
*Exceptional spectral phase in a dissipative collective spin model.*  
Physical Review A **106**, L010201 (2022).
26. A. Rubio-García, R.A. Molina and J. Dukelsky.  
*From integrability to chaos in quantum Liouvillians.*  
SciPost Physics Core **5**, 026 (2022).
27. P. Sarriguren.  
*Competition between weak and  $\alpha$ -decay modes in superheavy nuclei.*  
Physical Review C **105**, 014312 (2022).
28. T. Stauber and J. González.  
*Encounter with a stranger metal.*  
Nature Physics **18**, 619 (2022).

29. I. Toumia, S. Dalbouha, M. Mogren Al-Mogren, O. Yazidia, N. Jaïdane, M. Carvajal and M.L. Senent.  
*Theoretical spectroscopic study of two ketones of atmospheric interest: Methyl glyoxal ( $CH_3COCHO$ ) and methyl vinyl ketone ( $CH_3COCH=CH_2$ ).*  
Journal of Physical Chemistry A **126**, 7230 (2022).
30. A. Vitez-Sveiczer, A. Algara, A.I.Morales, B.Rubio, G.G.Kiss, P.Sarriguren,...et al.  
*The  $\beta$ -decay of  $^{70}Kr$  into  $^{70}Br$ : Restoration of the pseudo-SU(4) symmetry.*  
Physics Letters B **830**, 137123 (2022).

**PUBLICACIONES CONJUNTAS CON EL DPTO. DE ENVYMED / PUBLICATIONS IN COMMON WITH THE ENVYMED DEPARTMENT**

31. J.A. Briz, M.J.G. Borge, B. Rubio, J. Agramunt, A. Algara, A.Y. Deo, M.E. Estévez Aguado, G. Farrelly, L.M. Fraile, W. Gelletly, A. Maira, E. Nácher, A. Perea, Zs. Podolyák, A. Poves, P. Sarriguren and O. Tengblad.  
*Clarifying the structure of low-lying states in  $^{72}Br$ .*  
Physical Review C **105**, 014323 (2022).

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

32. D. R. Abujetas, J. Olmos-Trigo, and J. A. Sánchez-Gil.  
*Tailoring accidental double bound states in the continuum in all-dielectric metasurfaces.*  
Advanced Optical Materials **10**, 2200301 (2022).
33. D. R. Abujetas, N. de Sousa, A. García-Martín, J. M. Llorens, and J. A. Sánchez-Gil.  
*Engineering bound states in the continuum at telecom wavelengths with non-Bravais lattices.*  
Laser & Photonics Reviews **16**, 2100661 (2022).
34. Ali, SkM. Gupta, D. Kundalia, K. Saha, SwapanK. Tengblad, O. Ovejas, J.D. Perea, A. Martel, I Cederkall, J. Park, J. Szwec, S.  
*Resonance Excitations in  $^{7}Be(d, p)^{8}Be^*$ to Address the Cosmological Lithium Problem.*  
Physical Review Letters 128 – 25 (2022). <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.128.252701>
35. G. Álvarez-Pérez, J. Duan, J. Taboada-Gutiérrez, Q. Ou, E. Nikulina, S. Liu, J. H. Edgar, Q. Bao, V. Giannini, R. Hillenbrand, J. Martín-Sánchez, A. Y. Nikitin, P. Alonso-González.  
*Negative reflection of nanoscale-confined polaritons in a low-loss natural medium.*  
Sciences Advances **8**, eabp8486 (2022).
36. Ávarez, J.; Martínez-Ramírez, S.; Martínez, E.  
*Micro-Raman spectroscopy characterization of magneto-primed and drought-stressed triticale seeds.*  
Romanian Journal of Physics 67, 805 (2022).
37. I. B. Becerril-Castro, I. Calderon, J. Ockova, M. Liebel, N. F. van Hulst, V. Giannini, and R. A. Alvarez-Puebla.  
*Direct Modular Printing of Plasmonic Chemosensors.*  
ACS applied materials & interfaces **14**, 57165–57170 (2022).
38. M. Beverina, S. Sánchez-Cortés, F.I. Schabes, J. Zapata, M.L. Arias Cassará, M.E. Tuttolomondo.  
*Spectroscopic characterization (Raman and infrared) of *Aloe maculata* from the north Argentina region.*  
Vibrational Spectroscopy **122**, 103423 (2022).
39. Boillos, J.M. Cortina-Gil,..., A. Boretzky, K. Borge, M. J. G.... T. Tengblad, et al.  
*Isotopic cross sections of fragmentation residues produced by light projectiles on carbon near 400A MeV.*  
Physical Review C 105 – 1 (2022). <https://doi.org/10.1103/PhysRevC.105.014611>
40. Briz, J.A. Nerio, A.N. Ballesteros, C. Borge, M.J.G. Martinez, P. Perea, A. Tavora, V.G. Tengblad, O. Ciemala, M. Maj, A. Olko, P. Parol, W. Pedracka, A. Sowicki, B. Zieblinski, M. Nacher, E.  
*Proton Radiographs Using Position-Sensitive Silicon Detectors and High-Resolution Scintillators.*  
IEEE Transactions on Nuclear Science. 69 - 4, pp. 696 – 702 (2022). [10.1109/TNS.2022.3142618](https://doi.org/10.1109/TNS.2022.3142618)

41. M.V. Cañamares, M.G. Mieites-Alonso, M. Leona.  
*Raman, SERS and DFT analysis of the natural red dyes of Japanese origin Alkannin and Shikonin.*  
Spectrochimica Acta - Part A: Mol. Biomol. Spectrosc. **265**, 120382 (2022).
42. A. Crespo; G. Pérez; J.A. Jiménez; I. Llorente; S. Martínez-Ramírez; E. Cano; I. Díaz.  
*Evolution and Evaluation of Aesthetic Properties in Weathering Steel Accelerated Patinas: The Role of Lepidocrocite.*  
Metals **12**, 977 (2022).
43. Douass, O.; Samoudi, B.; Bendaou, O.; Sánchez-Cortés, S.  
*A Brief Review of Recent Advances in Surface-Enhanced Raman Spectroscopy and Microfluidics Technology for the Ultrasensitive Detection of Pesticides.*  
Egyptian Journal of Chemistry **65**, 133-150 (2022).
44. H. Ekawa for the WASA-FRS collaboration (including C. Rappold).  
*WASA-FRS HypHI experiment at GSI for studying light hypernuclei.*  
EPJ Web of Conference **271**, 08012 (2022). <https://doi.org/10.1051/epjconf/202227108012>
45. A. Espina, M.V. Cañamares, Z. Jurašeková, S. Sánchez-Cortés.  
*Analysis of Iron Complexes of Tannic Acid and Other Related Polyphenols as Revealed by Spectroscopic Techniques: Implications in the Identification and Characterization of Iron Gall Inks in Historical Manuscripts.*  
ACS Omega **7**, 27937 (2022).
46. A. Espina, S. Sánchez-Cortés, Z. Jurašeková.  
*Vibrational Study (Raman, SERS, and IR) of Plant Gallnut Polyphenols Related to the Fabrication of Iron Gall Inks.*  
Molecules **27**, 279 (2022).
47. C. Florian, Y. Fuentes-Edfuf, E. Skoulas, E. Stratakis, S. Sanchez-Cortes, J. Solis, J. Siegel.  
*Influence of Heat Accumulation on Morphology Debris Deposition and Wetting of LIPSS on Steel upon High Repetition Rate Femtosecond Pulses Irradiation.*  
Materials **15**, 7468 (2022).
48. Frías, M.; Martínez-Ramírez, S.; Vigil de la Villa, R.; García-Giménez, R.; Sánchez de Rojas, M.I.  
*New scientific evidence of the effect of high temperatures and long curing times on MK-blended cement paste mineralogy.*  
Cement and Concrete Research **152**, 106657 (2022).
49. Gerst, R.-B. Blazhev, A. Moschner, K. Doornenbal, P. Obertelli, A. Nomura, K. Ebran, J.-P. Hilaire, S. Libert, J. Authelet, A. Jungclaus, , et al.  
 *$\gamma$ -ray spectroscopy of low-lying yrast and non-yrast states in neutron-rich Kr 94,95,96.*  
Physical Review C **105**, 024302 (2022). DOI: [10.1103/PhysRevC.105.024302](https://doi.org/10.1103/PhysRevC.105.024302)
50. M. Heil,...MJG Borge,... A. Perea,...et al..O. Tengblad.  
*A new Time-of-flight detector for the R3B setup.*  
European Physical Journal A **58**, 248 (2022). <https://doi.org/10.1140/epja/s10050-022-00875-8>
51. Husillos-Rodríguez, N.; Martínez-Ramírez, S.; Zarzuela, R.; Mosquera, M.J.; Blanco-Varela, M.T.; García-Lodeiro, I.  
*Effect of alkoxy silane on early age hydration in portland cement pastes.*  
Journal of Building Engineering **50**, 104127 (2022).
52. A.Kasagi, E. Liu, M. Nakagawa, H. Ekawa, J. Yoshida, W. Dou, A. Muneem, K. Nakazawa, C. Rappold, N. Saito, T. R. Saito, M. Taki, Y. K. Tanaka, H. Wang.  
*Precise measurement on the binding energy of hypertriton from the nuclear emulsion data using analysis with machine learning.*  
Revista Mexicana de Física, Suppl. 3, 0308122 (2022). [10.31349/SuplRevMexFis.3.0308122](https://doi.org/10.31349/SuplRevMexFis.3.0308122)
53. Kundalia, K. Gupta, D. Ali, SkM. Saha, SwapanK. Tengblad, O. Ovejas, J.D. Perea, A. Martel, I Cederkall, J. Park, J. Szewc, S. Moro, A. M..  
*Study of elastic and inelastic scattering of Be-7+C-12 at 35 MeV.*  
Physics Letters B **833**, (2022). <https://doi.org/10.1016/j.physletb.2022.137294>

54. Lehr, C. Wamers, F. Aksouh, F. Aksyutina,...,Borge, M. J. G, Tengblad, O.,Wimmer, K., *et al.*  
*Unveiling the two-proton halo character of Ne-17: Exclusive measurement of quasi-free proton-knockout reactions.*  
Physics Letters B. 827, ELSEVIER, (2022). <https://doi.org/10.1016/j.physletb.2022.136957>
55. Liu, X.; Cederwall, B.; Qi, C.; Wyss, R.A.; Aktas, Ertoprak, A., Zhang, W..., Jungclaus, A. *et al.*  
*Evidence for spherical-oblate shape coexistence in Tc 87.*  
Physical Review C 106, 034304 (2022).
56. M. Nakagawa, A. Kasagi, E. Liu, H. Ekawa, J. Yoshida, W. Dou, Y. He, A. Muneem, K. Nakazawa, C. Rappold, N. Saito, T. R. Saito, S. Sugimoto, M. Taki, Y. K. Tanaka, H. Wang, Y. Gao, A. Yanai, M. Yoshimoto.  
*Unique approach for precise determination of binding energies of hypernuclei with nuclear emulsion and machine learning.*  
EPJ Web of Conference 271, 11006 (2022). <https://doi.org/10.1051/epjconf/202227111006>
57. Pérez-Vidal, R.M. Gadea, A. Domingo-Pardo, C. Gargano, A. Valiente-Dobón, J.J. Clément, E. Lemasson, A. Coraggio, L. Siciliano, M. Szilner, S., A. Jungclaus, *et al.*  
*Evidence of Partial Seniority Conservation in the  $\pi/g9/2$  Shell for the N=50 Isotones.*  
Physical Review Letters 129, 112501 (2022). DOI: [10.1103/PhysRevLett.129.112501](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.129.112501)
58. Di Pietro, A. Shotter, A.C. Fernandez, Garcia, J.P., Figuera, P. Fisichella, M. Moroc, A.M. Alcorta, M. Borge, M. J. G. Davinson, T. Ferrera, F. Laird, A. M. Lattuada, M. Soic, N. Tengblad, O. Torresi, D. Zadro, M.  
*Hints of quasi-molecular states in B-13 via the study of Li-9-He-4 elastic scattering.*  
Physics Letters B 832, (2022). <https://doi.org/10.1016/j.physletb.2022.137256>
59. Prieto-Vicioso, E.; Flores-Sasso, V.; Martínez-Ramírez, S.; Ruiz-Valero, L.; Pérez, G.  
*Characterization of lime mortar and plasters of fortress concepcion de la vega karakterizacija apnene malte in ometov trdnjave concepcion de la vega.*  
Materiali in Tehnologije 56, 533-539 (2022).
60. F. Puliga, V. Zuffi, A. Zambonelli, O. Franciosi, S. Sanchez-Cortes.  
*Spectroscopic analysis of mushrooms by surface-enhanced Raman scattering (SERS).*  
Chemical and Biological Technologies in Agriculture **9**, 1 (2022).
61. J. L. Pura, R. Kabonire, D. R. Abujetas, and J. A. Sánchez-Gil.  
*Tailoring Polarization Conversion in Achiral All-Dielectric Metasurfaces by Using Quasi-Bound States in the Continuum.*  
Nanomaterials **12**, 2252 (2022).
62. M. Rider, A. Buendía, D. R. Abujetas, P. A. Huidobro, J. A. Sánchez-Gil, and V. Giannini.  
*Advances and prospects in topological nanoparticle photonics.*  
ACS Photonics **9**, 1483-1499 (2022).
63. R.J.G. Rubira, S.A. Camacho, C.J.L. Constantino, S. Sánchez-Cortés.  
*Increasing the sensitivity of surface-enhanced Raman scattering detection for s-triazine pesticides by taking advantage of interactions with soil humic substances.*  
Journal of Raman Spectroscopy **53**, 40 (2022).
64. T. R. Saito, for the WASA-FRS collaboration and the Emulsion-ML collaboration (including C.Rappold).  
*Studies of hypernuclei with heavy-ion beams, nuclear emulsions and machine learning.*  
EPJ Web of Conference 271, 08003 (2022). <https://doi.org/10.1051/epjconf/202227108003>
65. Sánchez-González, V. Silva, C. Suazo, J.P. Soto, S. Sanchez-Cortes, M. Campos-Vallette, P. Leyton, E. Imbarack.  
*SERS Study on the Aggregation Mechanisms Resulting from the Orientation of Dipyridinic Derivatives on Gold Nanoparticles.*  
Spectrochimica Acta Part A Mol. Biomol. Spectrosc. **264**, 120286 (2022).
66. G. Serrera, J. González-Colsa, V. Giannini, J. M. Saiz, P. Albella.  
*Enhanced optical chirality with directional emission of Surface Plasmon Polaritons for chiral sensing applications.*  
Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer **284**, 108166 (2022).

67. A. Spataru, C. Hornung, T. Dickel, E. Haettner, S. Pietri, S. A. San Andres, S. Bagchi, D. L. Balabanski, J. Bergmann, J. Ebert, A. Finley, H. Geissel, F. Greiner, O. Hall, S. Kaur, W. Lippert, I. Miskun, J. h. Otto, W. R. Plass, A. Prochazka, S. Purushothaman, C. Rappold, A. Rink, C. Scheidenberger, Y. K. Tanaka, H. Toernqvist, H. Weick, J. S. Winfield.  
*First coupling of the FRS particle identification and the FRS-Ion Catcher data acquisition systems: The case of In-109.*  
*Nuclear Instruments and Methods in Physics Research, Section B* 522, pp. 32–37, (2022).  
<https://doi.org/10.1016/j.nimb.2022.04.003>
68. R. Vigil; M. Frías; S. Martínez; L. Fernández; R. García.  
*Concrete/glass construction and demolition waste (CDW) synergies intermacy eco-cement paste mineralogy.*  
*Materials* 15, 4661 (2022).
69. X. Wu, M.V. Cañamares, I. Kakoulli, S. Sánchez-Cortés.  
*Chemical Characterization and Molecular Dynamics Simulations of Bufotenine by Surface-Enhanced Raman Scattering (SERS) and Density Functional Theory (DFT).*  
*Journal of Physical Chemistry Letters* 13, 5831 (2022).
70. X. Xiao, M. C. Turino, I. B. Becerril-Castro, S. A. Maier, R. A. Alvarez-Puebla, and V. Giannini.  
*Extraordinarily Transparent Metaldielectrics for Infrared and Terahertz Applications.*  
*Advanced Photonics Research* 3, 220019 (2022).

#### **PUBLICACIONES CONJUNTAS CON EL DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / PUBLICATIONS IN COMMON WITH THE MACROMOLECULAR DEPARTMENT**

71. R.I. Rodriguez-Beltran, J. Prada-Rodrigo, A. Crespo, T.A. Ezquerra, P. Moreno, and E. Rebollar.  
*Physicochemical Modifications on Thin Films of Poly(Ethylene Terephthalate) and Its Nanocomposite with Expanded Graphite Nanostructured by Ultraviolet and Infrared Femtosecond Laser Irradiation.*  
*Polymers* 14 (23), Article Number5243 (2022).

#### **PUBLICACIONES CONJUNTAS CON EL DPTO. DE QUÍMICA Y FÍSICA TEÓRICAS / PUBLICATIONS IN COMMON WITH THE THEORETICAL PHYSICS AND CHEMISTRY DEPARTMENT**

- J.A. Briz, M.J.G. Borge, B. Rubio, J. Agramunt, A. Algora, A.Y. Deo, M.E. Estévez Aguado, G. Farrelly, L.M. Fraile, W. Gelletly, A. Maira, E. Nácher, A. Perea, Zs. Podolyák, A. Poves, P. Sarriugure and O. Tengblad.  
*Clarifying the structure of low-lying states in 72Br.*  
*Physical Review C* 105, 014323 (2022).

#### **6.1.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS**

72. S. Colin, J. M. Fernández, C. Barrot, L.Baldas, S. Bajic S. and M. Rojas-Cárdenas.  
*Review of Optical Thermometry Techniques for Flows at the Microscale towards Their Applicability to Gas Microflows.*  
*Micromachines* 13, p. 1819 (2022).
73. Francisco Colmenero and Vicente Timón.  
*ZIF-75 under Pressure: Negative Linear Compressibility and Pressure-Induced Instability.*  
*Applied Sciences* (Switzerland), 12 (20) 10413 (2022). DOI: 10.3390/app122010413
74. Víctor J. Herrero, Isabel Tanarro, Izaskun Jiménez-Serra, Héctor Carrascosa, Guillermo Muñoz-Caro, Belén Maté.  
*Stability of urea in astrophysical ices. A laboratory study of VUV irradiation and high energy electron bombardment.*  
*Monthly Notices of the Royal Astronomical Society* 517, 1058–1070 (2022). DOI:10.1093/mnras/stac265814/09/22
75. Víctor J. Herrero, Miguel Jiménez-Redondo, Ramón J. Peláez, Belén Maté and Isabel Tanarro.  
*Structure and Evolution of Interstellar Carbonaceous Dust. Insights from the Laboratory.*  
*Frontiers in Astronomy and Space Sciences*. 9, 20 pp. 1083288 (2022).  
Open access. DOI 10.3389/fspas.2022.1083288

76. Miguel Jiménez-Redondo, Isabel Tararro and Víctor J. Herrero.  
*Time evolution of neutral and charged species in Ar/C<sub>2</sub>H<sub>2</sub> capacitively-coupled RF discharges.*  
*Plasma Sources Sci. Technol.* **31**, 065003 (2022).
77. Germán Molpeceres, Johannes Kaestner, Víctor J. Herrero, Ramón J. Peláez, and Belén Maté.  
*Desorption of organic molecules from interstellar ices, combining experiments and computer simulations: Acetaldehyde as a case study.*  
*Astronomy & Astrophysics*, 664, A169 (2022). DOI:10.1051/0004-6361/202243489.
78. Germán Molpeceres, Izaskun Jiménez-Serra, Yasuhiro Oba, Thanh Nguyen, Naoki Watanabe, Juan García de la Concepción, Belén Maté, Ricardo Oliveira, and Johannes Kaestner.  
*Hydrogen abstraction reactions in formic and thioformic acid isomers by hydrogen and deuterium atoms.*  
*Astronomy & Astrophysics*, 663 (2022). DOI: 10.1051/0004-6361/202243366

#### 6.1.4 **DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS**

79. A. Cardil, M. Palenzuela, J.F. Vega, M.E.G. Mosquera.  
*Rheology of poly (glycidyl methacrylate) macromolecular nano-assemblies.*  
*Polymers* **14**, 455 (2022).
80. T.A. Ezquerra, A. Sanz, A. Linares, M.C. García-Gutiérrez, A. Nogales, S. Paszkiewicz, A. Zubkiewicz, A. Szymczyk.  
*Relaxation dynamics of biomass-derived copolymers with promising gas-barrier properties.*  
*Frontiers in Chemistry* **10**, 921787 (2022).
81. T.A. Ezquerra, A. Nogales, M.C. García-Gutiérrez, E. Rebollar, O. Gálvez, I. Šics, M. Malfois.  
*Probing structure development in Poly(vinylidene Fluoride) during “operando” 3-D printing by Small and Wide Angle X-ray Scattering Polymer.*  
*Polymer* **249**, 124827 (2022).
82. E. Gutiérrez-Fernández, T.A. Ezquerra, M.C. García-Gutiérrez.  
*Additive Effect on the Structure of PEDOT:PSS Dispersions and Its Correlation with the Structure and Morphology of Thin Films.*  
*Polymers* **14**, 141 (2022).
83. A. Nogales, C. García, A. Campo, T.A. Ezquerra, J. Rodríguez-Hernández.  
*Micropatterned functional interfaces on elastic substrates fabricated by fixing out of plane deformations.*  
*Softmatter* **18**, p. 6105-6114 (2022).
84. F.M. Oliveira, L. Martins, N.V. Dencheva, T.A. Ezquerra, Z.Z. Denchev.  
*Tunable Electromagnetic Interference Shielding Properties of Binary Thermoplastic Composites Prepared by Reactive Microencapsulation.*  
*Applied Polymer Materials* **4**, p. 3482-3490 (2022).
85. M. Sanviti, D.E. Martínez-Tong, E. Rebollar, T.A. Ezquerra, M.C. García-Gutiérrez.  
*Crystallization and phase separation in PEDOT:PSS/PEO blend thin films: Influence on mechanical and electrical properties at the nanoscale.*  
*Polymer* **262**, 12547 (2022).
86. J.F. Vega, V. Souza-Egipsy, M.T. Expósito, J. Ramos.  
*Melting temperature depression of polymer single crystals: application to the eco-design of tie-layers in polyolefinic-based multilayered films.*  
*Polymers* **14**, 1622 (2022).
87. J.F. Vega, J. Ramos, V. Souza-Egipsy, J. Martínez-Salazar.  
*On the melting behaviour of linear polyethylene single crystals in mixtures with homogeneous short chain branched polyolefins.*  
*Polymer* **256**, 125256 (2022).
88. J.F. Vega, H. Salavagione, S. Quiles-Díaz, H. Seyler, M.A. Gómez-Fatou, A. Flores.  
*The role of molecular architecture on the viscoelastic properties of thermoreversible polyurethane adhesives.*  
*Polymer* **262**, 125431 (2022).

**PUBLICACIONES CONJUNTAS CON EL DPTO. DE ENVYMED / PUBLICATIONS IN COMMON WITH THE ENVYMED DEPARTMENT**

R.I. Rodríguez-Beltrán, J. Prada-Rodrigo, A. Crespo, T.A. Ezquerra, P. Moreno, and E. Rebollar.  
*Physicochemical Modifications on Thin Films of Poly(Ethylene Terephthalate) and Its Nanocomposite with Expanded Graphite Nanostructured by Ultraviolet and Infrared Femtosecond Laser Irradiation.*  
 Polymers **14** (23), 5243 (2022).

**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. J. Fernando Barbero G. and Fernando García-Avello Boffás.  
*Curiosidades del oscilador armónico cuántico.*  
 Revista Española de Física **36**, 2, Pg. 8-12 (2022).
2. G. Calcagni, M.G. Di Luca and T. Fodran.  
*Lectures on classical and quantum cosmology.*  
 PoS CORFU2021, 317 (2022).
3. H. El Hadki V. Gámez, S. Dalbouha, K. Marakchi, O.K. Kabbaj, N. Komiha, M. Carvajal and M.L. Senent.  
*Theoretical spectroscopic study of acetyl ( $CH_3CO$ ), vinoxy ( $CH_2COH$ ), and 1-methylvinoxy ( $CH_3COCH_2$ ) radicals. Barrierless formation processes of acetone in the gas phase.*  
 Open Research Europe **1**, 23 (2022).
4. M.K. Gaidarov, E. Moya de Guerra, A.N. Antonov, I.C. Danchev, P. Sarriguren and D.N. Kadrev.  
*An alternative approach within the CDFM for studies of nuclear symmetry energy components and their ratio*  
 Nuclear Theory **39**, p. 26 (2022).  
 eds. M. Gaidarov, N. Minkov, Heron Press, Sofia, ISSN: 1313–2822.

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

5. I. B. Becerril-Castro, I. Calderon, N. Pazos-Perez, L. Guerrini, F. Schulz, N. Feliu, I. Chakraborty, V. Giannini, W. J. Parak, R. A. Alvarez-Puebla.  
*Gold Nanostars: Synthesis, Optical and SERS Analytical Properties.*  
 Analysis & Sensing e202200005 (2022).

**6.2.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS**

6. Francisco Colmenero, Álvaro Lobato and Vicente Timón.  
*Compressing the Channels in the Crystal Structure of Copper Squareate Metal-Organic Framework.*  
 Solids 3(2), 374-384 (2022). DOI: 10.3390/solids3020026

## 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. Domínguez-Adame Acosta, L. Chico Gómez, A. Relaño Pérez, A. Díaz Fernández, R.A. Molina Fernández, Y. C. Baba and A. López Corps.  
*Prpuesta de una nueva metodología para la enseñanza de la física de la materia condensada: clase semipresencial con formato de taller.*  
Colección: Proyectos de Innovación Docente, UCM, 2022.

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

2. S. Ter Huurne, D. R. Abujetas, N. Van Hoof, J.A. Sanchez-Gil, J. Gomez Rivas.  
*Electromagnetic field confinement by bound states in the continuum.*  
47th International Conference on Infrared, Millimeter and Terahertz Waves (IRMMW-THz), 2022  
ISBN:978-1-7281-9428-8

## 6.4 TESIS DOCTORALES PH.D. THESES

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

**Title:** The Vacuum State in Hybrid Loop Quantum Cosmology.

**University:** Autónoma de Madrid. Sciences Faculty.

**Date:** 27<sup>th</sup> of May 2022

**Mark:** Sobresaliente cum laude.

**Candidate:** Santiago Prado Loy.

**Supervisors:** Guillermo A. Mena Marugán and Beatriz Elizaga Navascués.

**Title:** The Covariant Phase Space of Gravity with Boundaries.

**University:** Universidad Carlos III de Madrid (Escuela Politécnica Superior).

**Date:** 17<sup>th</sup> of June 2022.

**Mark:** Sobresaliente cum laude.

**Candidate:** María del Valle Varo García.

**Supervisors:** Jesús Fernando Barbero González, Juan Margalef Bentabol and Eduardo Jesús Sánchez Villaseñor.

## 6.5 TRABAJOS DE MÁSTER, GRADO Y OTRAS TITULACIONES MASTER, GRADE AND OTHER DEGREES THESES

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

**Title:** Potentials in Loop Quantum Cosmology

**Type:** MSc thesis

**University:** ENS Lyon, Université Claude Bernard Lyon 1 (Francia). Département de Physique

**Date:** 1<sup>st</sup> of September 2022

**Mark:** Honors

**Candidate:** Simon Iteanu

**Supervisor:** Guillermo A. Mena Marugán

**Title:** Estados ligados en el continuo en guías de onda unidimensionales

**Type:** Grade thesis

**University:** Universidad Técnica Federico Santa María, Chile

**Date:** 9<sup>th</sup> of September 2022

**Mark:** 100/100

**Candidate:** Sofía Catalina Pinto Muñoz

**Supervisor:** Rafael Alejandro Molina Fernández

#### **6.5.2 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS**

**Title:** Laboratory experiments on diffusion and sublimation of methane through ice dust layers to mimic cometary nucleus activity

**Type:** Master thesis

**University:** Master Aerospace Engineering Student, Space Exploration, TU Delft, The Netherlands

**Date:** 18<sup>th</sup> of July 2022

**Mark:** 9/10

**Candidate:** Carla Tamai

**Supervisor:** María Belén Maté Naya / Stephanie Cazaux

## Capítulo 7

### TABLAS Y DATOS

*Chapter 7*

*TABLES AND DATA*

## 7.1 INDICADORES DE PUBLICACIONES Y FORMACIÓN PUBLICATIONS AND TRAINING INDICATORS

	2016	2017	2018	2019	2020	2021	2022
Number of ISI publications	159	148	146	156	156	134	88
Number of non-ISI publications	4	3	2	3	3	0	8
Total stock of PhD fellowships and contracts	16	18	17	19	19	19	15
Number of PhD Theses defended	8	4	4	3	3	4	2
“Credits” in PhD, MSc and BSc Courses	89	57,3	87	171	89,2	159	127

## 7.2 RESUMEN DE PUBLICACIONES EN REVISTAS JCR-ISI SUMMARY OF PUBLICATIONS IN JCR-ISI-JOURNALS

JOURNAL	IMPACT FACTOR (JCR -2021)	NUMBER OF PAPERS
Living Reviews in Relativity	42.9	1
Nature Physics	19.684	1
Science Advances	14.980	1
Progress in Particle and Nuclear Physics	12.425	1
Cement and Concrete Research	11.958	1
Laser& Photonics Reviews	10.947	1
ACS applied materials & interfaces	10.383	1
Advanced Optical Materials	10.050	1
Physical Review Letters	9.185	2
Journal of Cosmology and Astroparticle Physics	7.280	1
Journal of Building Engineering	7.144	1
ACS Photonics	7.077	1
Journal of Physical Chemistry Letters	6.888	1
Journal of High Energy Physics	6.376	2
Astronomy and Astrophysics	6.240	2
Nanomaterials	5.719	1
Frontiers in Chemistry	5.545	1
Physical Review D	5.407	5
Mothly Notices of The Royal Astronomical Society	5.235	1
Polymers	4.967	4
PHYSICS LETTERS B	4.950	4
Molecules	4.927	1
ACS APPLIED POLYMER MATERIALS	4.855	1
Chemical and Biological Technologies in Agriculture	4.839	1
Spectrochimica Acta - Part A	4.831	2
Polymer	4.432	4
Journal of Chemical Physics	4.304	1

<b>ACS Omega</b>	<b>4.132</b>	<b>1</b>
<b>Plasma Sources Science and Technology</b>	<b>4.124</b>	<b>1</b>
Frontiers in Astronomy and Space Sciences	4.055	2
<b>Soft Matter</b>	<b>4.046</b>	<b>1</b>
<b>Physical Review B</b>	<b>3.908</b>	<b>2</b>
<b>Classical and Quantum Gravity</b>	<b>3.853</b>	<b>1</b>
MATERIALS	3.748	2
<b>Micromachines</b>	<b>3.523</b>	<b>1</b>
<b>Physical Review C</b>	<b>3.199</b>	<b>6</b>
<b>European Physical Journal A</b>	<b>3.131</b>	<b>1</b>
<b>Physica Scripta</b>	<b>3.081</b>	<b>1</b>
<b>Physical Review A</b>	<b>2.971</b>	<b>6</b>
<b>The journal of physical chemistry, A</b>	<b>2.944</b>	<b>1</b>
<b>Applied Sciences (Switzerland)</b>	<b>2.838</b>	<b>1</b>
<b>Universe</b>	<b>2.813</b>	<b>1</b>
<b>Journal of Raman Spectroscopy</b>	<b>2.727</b>	<b>1</b>
Metals	2.695	1
<b>Vibrational Spectroscopy</b>	<b>2.382</b>	<b>1</b>
<b>Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer</b>	<b>2.342</b>	<b>1</b>
<b>Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical</b>	<b>2.331</b>	<b>1</b>
<b>IEEE Transactions on Nuclear Science</b>	<b>1.703</b>	<b>1</b>
<b>Revista Mexicana de Fisica</b>	<b>1.702</b>	<b>1</b>
Romanian Journal of Physics	1.662	1
<b>Nuclear Instruments and Methods in Physics Research, Section B</b>	<b>1.279</b>	<b>1</b>
Materiali in Tehnologije	0.650	1
<b>Advanced Photonics Research</b>	<b>0</b>	<b>1</b>
Egyptian Journal of Chemistry	0	1
<b>EPJ Web of Conferences</b>	<b>0</b>	<b>3</b>
<b>SciPost Physics Core</b>	<b>0</b>	<b>1</b>
<b>TOTAL</b>	<b>Average Impact Factor: 5,48</b>	<b>88</b>

### 7.3 EVOLUCIÓN DEL ÍNDICE DE IMPACTO (REVISTAS JCR-ISI) POR DEPARTAMENTOS / EVOLUTION OF THE IMPACT FACTOR (JCR-ISI-JOURNALS) BY DEPARTMENTS

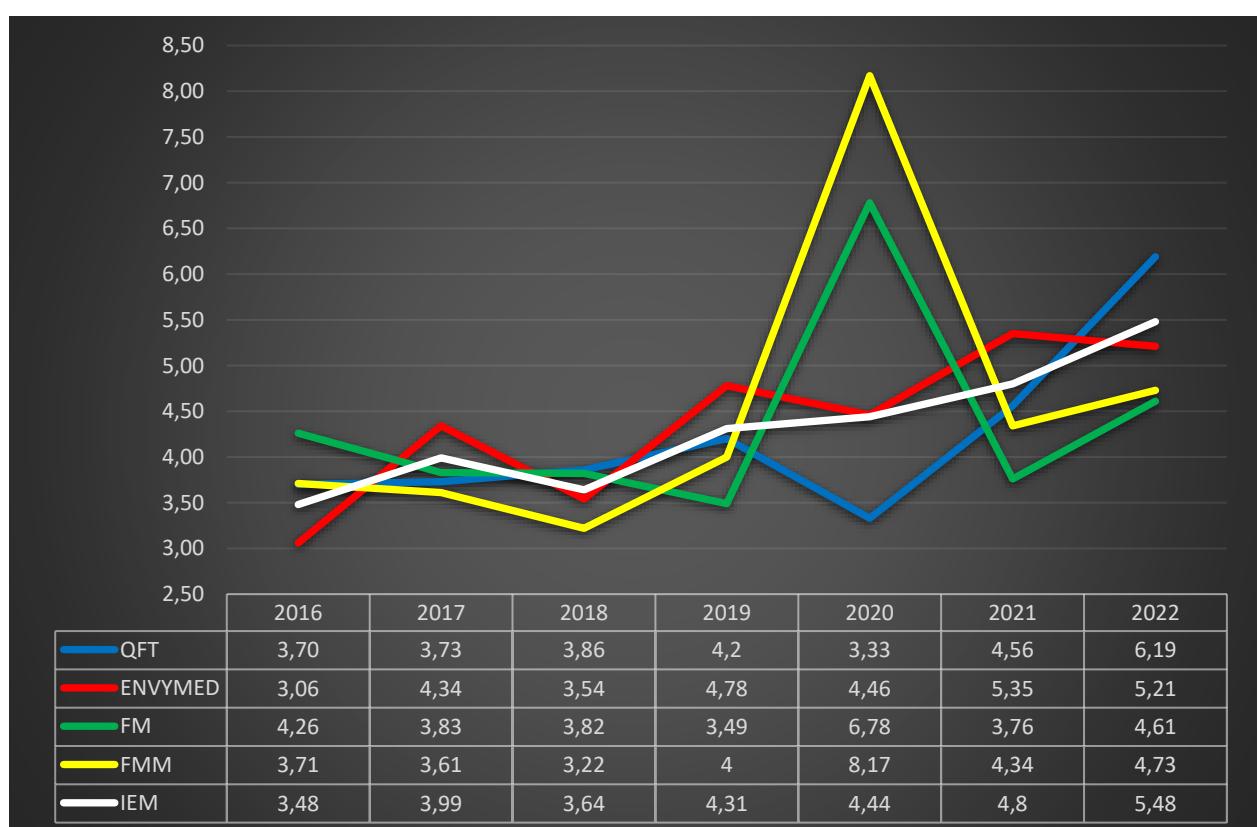
#### Department Key:

Theoretical Physics and Chemistry (**QFT**)

Molecular Physics (**FM**)

Macromolecular Physics (**FMM**)

Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy (**ENVYMED**)



## 7.4 PERSONAL POR DEPARTAMENTOS

*PERSONNEL BY DEPARTMENTS*

Department	Scientific Staff		“Ramón & Cajal” and PostDoc		Adjoint Researchers		Rest of the Scientific Personnel <sup>1</sup>		Support Staff		Total		
	M	F	M	F	M	F	M	F	M	F	M	F	TOTAL
<b>QFT</b>	7	1			1		2			1	10	2	<b>12</b>
<b>ENVYMED</b>	6	4	1		1		6	2	1	1	15	7	<b>22</b>
<b>FM</b>	9	2					1		2		12	2	<b>14</b>
<b>FMM</b>	4	4	1			1	2		2	2	9	7	<b>16</b>
<b>ADMON.</b>									2	7	2	7	<b>9</b>
<b>IEM</b>	<b>26</b>	<b>11</b>	<b>2</b>		<b>2</b>	<b>1</b>	<b>11</b>	<b>2</b>	<b>7</b>	<b>11</b>	<b>48</b>	<b>25</b>	<b>73</b>

<sup>1</sup>“Authorized Stay” excluded

(M: Male, F: Female. See also the “Department Key” in section 7.3)

**Personal del IEM sin incluir Doctores Vinculados / 70**

*Personnel of the IEM excluding the Adjoint Researchers: 70*

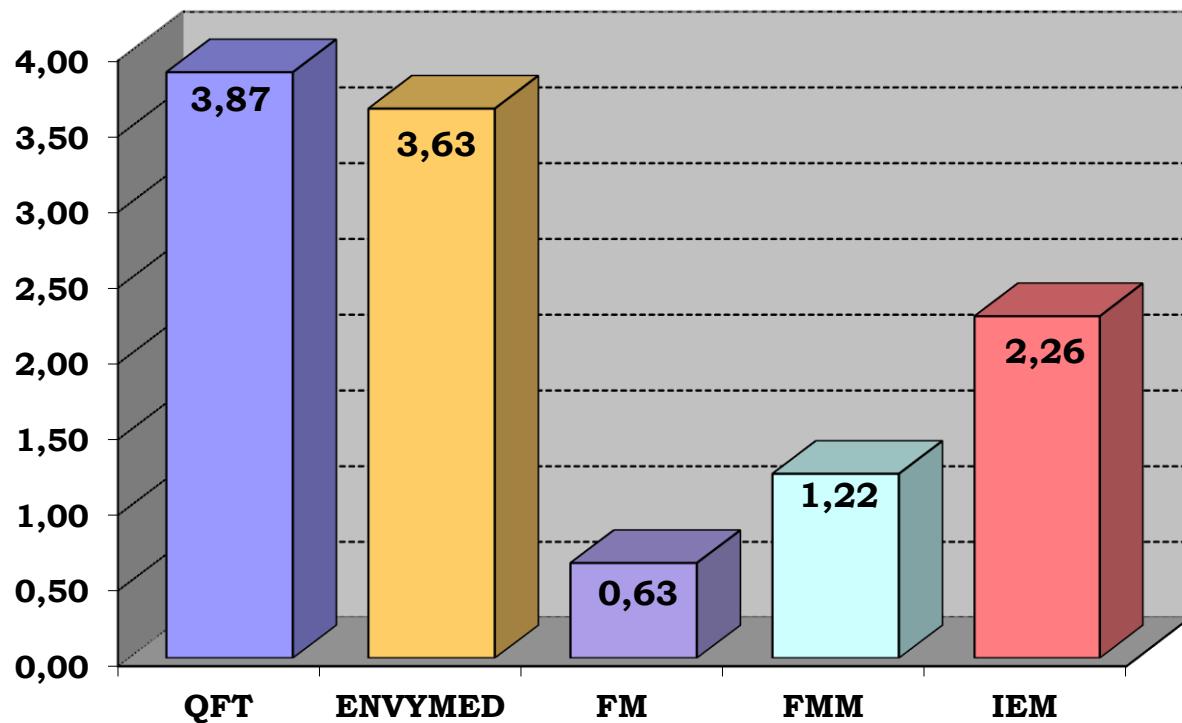
## 7.5 NÚMERO DE PUBLICACIONES POR DEPARTAMENTOS

*NUMBER OF PAPERS BY DEPARTMENTS*

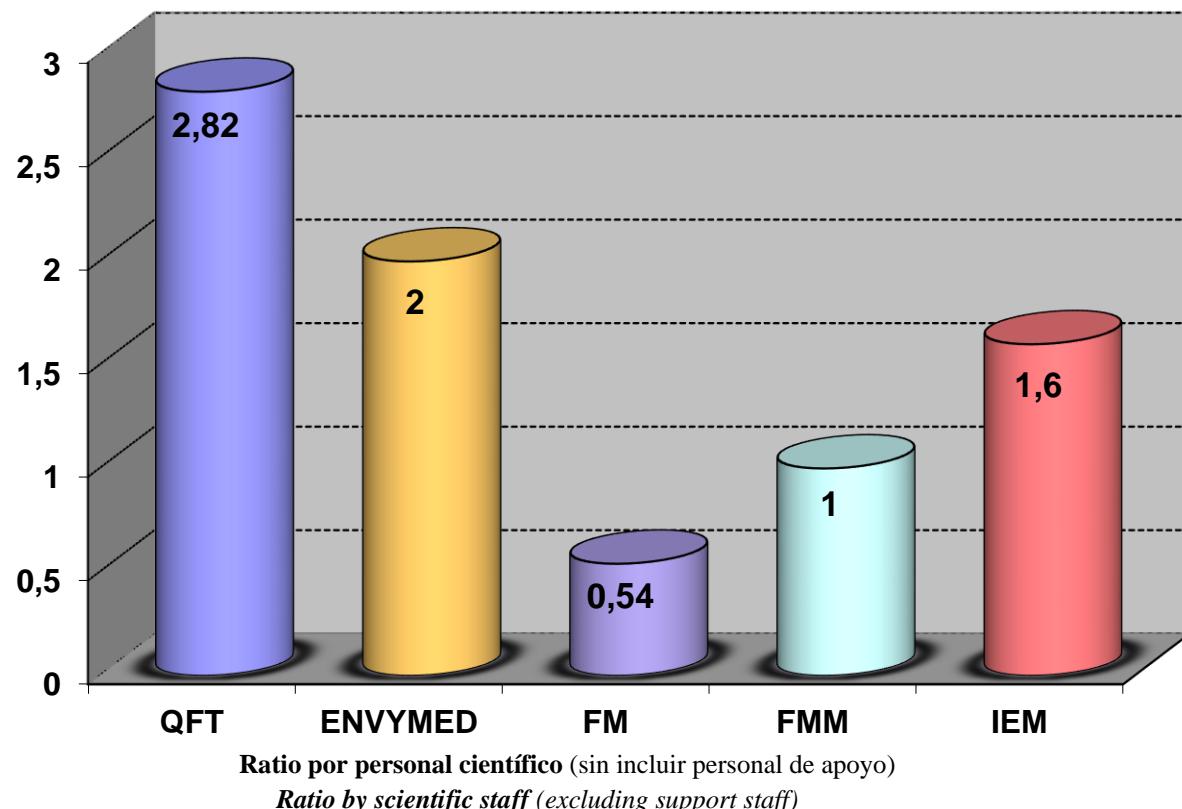
	QFT	ENVYMED	FM	FMM	IEM
ISI publications	<b>31 (1)<sup>1</sup></b>	<b>39(+2)<sup>1</sup></b>	<b>7</b>	<b>11(1)<sup>1</sup></b>	<b>88</b>
Other publications	<b>5</b>	<b>2</b>	<b>1</b>	<b>0</b>	<b>8</b>

<sup>1</sup>In 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 “R&C” y “PostDoc”)  
Ratio by senior researcher (staff plus “R&C” and “PostDoc”)



Ratio por personal científico (sin incluir personal de apoyo)  
Ratio by scientific staff (excluding support staff)

- Ratio de publicaciones ISI del IEM por personal investigador senior (plantilla): 2,38  
Ratio of ISI publications of IEM per senior staff researcher