

Instituto de Estructura de la Materia

Memoria 2019

Consejo Superior de Investigaciones Científicas



MEMORIA 2019

SCIENTIFIC REPORT 2019

**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**

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 2019, 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 cuarenta y dos investigadores en plantilla distribuidos en los siguientes Departamentos:

Química y Física Teóricas (QFT)

Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados (ENVYMED)

Física Molecular (FM)

Física Macromolecular (FMM)

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

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

Esta actividad científica ha quedado plasmada durante 2019 en 156 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 2019, 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 forty-two permanent researchers distributed in the following Departments:

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

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

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

This scientific activity, during 2019, has crystallized in 156 ISI publications.

Capítulo 1
ESTRUCTURA DEL INSTITUTO

Chapter 1
INSTITUTE ORGANIZATION

DIRECCIÓN / DIRECTION

Director / Director: Dr. Guillermo Antonio Mena Marugán

Vicedirector 1º/ Assistant Director 1st: Prof. Tiberio Ezquerra Sanz

Vicedirector 2º/ Assistant Director 2nd: Dr. José M. Fernández Sánchez

Gerente / Manager: D^a Marta M^a Granja Perdices (hasta 14 de febrero) (*until February 14th*)

Gerente / Manager: D^a. Isabel Llerena de Frutos (desde 15 de febrero) (*since February 15th*)

JUNTA DE INSTITUTO / INSTITUTE BOARD

Presidente / President: Dr. Guillermo Antonio Mena Marugán

Secretaria / Secretary: D^a. Marta M^a Granja Perdices (hasta 14 febrero) (*until February 14th*)

Secretaria / Secretary: D^a. Isabel Llerena de Frutos (desde 15 febrero) (*since February 15th*)

Vocales / Members:

Dr. José Carlos Canalda Cámara

Prof. Tiberio Ezquerra Sanz

Dr. José M. Fernández Sánchez

Prof^a. M^a José García Borge

Prof. José González Carmona

Dra. M^a Belén Maté Naya

Dr. Rafael Molina Fernández

D. Miguel Ángel Moreno Alba

Dr. Juan Francisco Vega Borrego

CLAUSTRO CIENTÍFICO / SCIENTIFIC STAFF

Presidente / President: Dr. Guillermo A. Mena Marugán

Secretario / Secretary: Dr. Vincenzo Giannini

Personal Investigador / Scientific staff:

Dr. Fernando Ania García

Dr. J. Fernando Barbero González

Prof. Dionisio Bermejo Plaza

Dr. José Ántonio Briz Monago

Dr. Carlos Cabrillo García

Dr. Gianluca Calcagni

Dra. M^a Vega Cañamares Arribas

Dra. María José Capitán Aranda

Dr. Víctor Cruz Cañas

Dr. José Luis Doménech Martínez

Prof. Jorge Dukelsky Bercovich

Prof. Rafael Escribano Torres

Prof. Tiberio Ezquerra Sanz

Dr. Ricardo Fernández Perea

Dra. Araceli Flores Aguilar Amat

Dr. José M. Fernández Sánchez

Prof^a. María José García Borge

Dra. María Cruz García Gutiérrez

Dr. Eduardo Garrido Bellido

Prof. José González Carmona

Prof. Víctor J. Herrero Ruiz de Loizaga

Dra. Andrea Jungclaus

Dra. Amelia Linares Dos Santos

Prof. Javier Martínez de Salazar Bascuñana

Dra. M^a del Sagrario Martínez Ramírez

Dr. Raúl Zósimo Martínez Torres

Dra. Belén Maté Naya

Dra. Aurora Nogales Ruiz

Dr. Juan Ortigoso Martínez

Dr. Francisco Javier Ramos Díaz

Dr. Santiago Sánchez Cortés

Dr. José Antonio Sánchez Gil

Dr. Julio Francisco Santos Gómez

Prof. Pedro Sarriguren Suquilbide

Dra. M^a Luisa Senent Diez

Dra. Isabel Tanarro Onrubia

Dr. Guzmán Tejeda Gala

Prof. Olof E. I. Tengblad

Dr. Vicente Timón Salinero

Dr. Víctor Vaquero Soto

Dr. Juan Francisco Vega Borrego

Dra. Kathrin Wimmer

DEPARTAMENTOS DE INVESTIGACIÓN

RESEARCH DEPARTMENTS

DEPARTAMENTO DE QUÍMICA Y FÍSICA TEÓRICAS

THEORETICAL PHYSICS AND CHEMISTRY

Jefe del Departamento / Head of Department:

Dr. José González Carmona

Profesor de Investigación / Research Professor

Personal Científico / Research Staff:

Dr. Jorge Dukelsky Bercovich
 Dr. Pedro Sarriguren Suquilbide
 Dr. Jesús Fernando Barbero González
 Dr. Eduardo Garrido Bellido
 Dr. Guillermo Antonio Mena Marugán
 Dra. María Luisa Senent Diez
 Dr. Gianluca Calcagni
 Dr. Rafael Alejandro Molina Fernández
 Dr. Luis Javier Garay Elizondo

D. Alejandro García-Quismondo Martín

D. Álvaro Rubio García
 D^a. Yuriko Caterina Baba

D. Gabriel Pérez Sánchez

D. Santiago Prado Loy
 D^a. Valle Varo García
 Dr. Bogar Díaz Jiménez
 D^a. Victoria Gámez García
 D. Enrique Benito Matías
 D. Ignacio Casal Iglesias
 Dra. Laura Castelló Gomar
 D^a Alba Covelo Paz
 D^a Raquel Galazo García
 D^a. Beatriz Hernández Molinero
 D^a. María Hita Pérez
 D. Ignacio Cayetano Lluch Repiso
 D^a. Ana Palacios de Luis
 D. Carlos Rodríguez García
 D^a. Irene Serrano Aguilar

Profesor de Investigación / Research Professor
 Profesor de Investigación / Research Professor
 Investigador Científico / Research Scientist
 Investigador Científico / Research Scientist
 Investigador Científico / Research Scientist
 Investigadora Científica/ Research Scientist
 Científico Titular / Tenured Scientist
 Científico Titular/ Tenured Scientist
 Doctor Vinculado / Adjoint Researcher

Contratado Predoctoral (La Caixa) (desde 1 octubre) /
PhD Fellowship (since October 1st)

Contratado Predoctoral FPI / PhD Fellowship
 Becario JAE Intro (desde 1 febrero hasta 31 mayo) /

JAE Intro Fellowship (since February 1st until May 31st)
 Becario JAE Intro (desde 1 de Septiembre) /

JAE-Intro Fellow (since September 1st)

Estudiante de Doctorado / *PhD Student*

Estudiante de Doctorado / *PhD Student*

Estancia Postdoctoral / *Postdoctoral Authorized Stay*

Estancia Postdoctoral / *Postdoctoral Authorized Stay*

Estancia Temporal / *Authorized Stay*

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

Jefa del Departamento / Head of Department:Prof. M^a José García BorgeProfesora de Investigación / *Research Professor***Personal Científico / Research Staff:**

Prof. Olof Erik Tengblad

Profesor de Investigación / *Research Professor*

Dr. Carlos Cabrillo García

Investigador Científico / *Research Scientist*

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^a Vega Cañamares ArribasCientífica Titular / *Tenured Scientist*

Dr. Ricardo Fernández Perea

Científico Titular / *Tenured Scientist*

Dr. Vincenzo Giannini

Científico Titular / *Tenured Scientist*

Dra. Sagrario Martínez Ramírez

Científica Titular / *Tenured Scientist*

Dra. Kathrin Wimmer

Investigadora Contratada Ryc (desde 1 de junio) /

Tenure Track Contract R&C (since June 1st)

Dr. José Antonio Briz Monago

Contratado Doctor cargo a proyecto (desde 1 de marzo) /

Project Postdoc Contract (since March 1st)

Dra. Irene Marroquín Alonso

Contrato postdoctoral proyecto UE (hasta 3 abril) /

Postdoc UE Contract (until April 3rd)

Dr. Víctor Vaquero Soto

Contrato Postdoctoral FPI (hasta 16 noviembre) /

Postdoc FPI Contract (until november 16th)

Dra. Marina Molina Santos

Doctora Vinculada / *Adjoint Researcher*

Dra. Paz Sevilla Sierra

Doctora Vinculada / *Adjoint Researcher*

D. Álvaro Fernández Martínez

Contrato Titulado Superior / *University Graduate*

Dr. Moisés Martín Garrido

Contrato Titulado Superior con cargo a proyecto (desde

16 de noviembre) / *University Graduate (since November 16th)*

D. Javier Díaz Ovejas

Contrato Predoctoral FPI / *PhD Fellowship*

D. Diego Romero Abujetas

Contrato Predoctoral FPU / *PhD Fellowship*D^a Silvia Viñals OnsesContrato Predoctoral / *PhD Fellowship*D^a Alba Espina GarcíaEstancia Temporal (hasta 10 septiembre) / *Authorized Stay (until September 10th)*

Dr. Rafael J. Gonçalves Rubira

Estancia Temporal (hasta 10 septiembre) / *Authorized Stay (until September 10th)*D^a Zohreh ChahardoliEstancia Temporal ERASMUS / *Authorized Stay ERASMUS*D^a Leyre Fernández InchustaEstancia Temporal / *Authorized Stay*

D. Giorgio Galluzzi

Estancia Temporal / *Authorized Stay*

D. Vicente García Tavora

Estancia Temporal / *Authorized Stay*D^a Rosalía López MéndezEstancia Temporal / *Authorized Stay*

D. Íker Marcaida Ormazábal

Estancia Temporal / *Authorized Stay*

D. Alejandro Ortiz Cortés

Estancia Temporal / *Authorized Stay*D^a Inmaculada Posadillo de BringasEstancia Temporal / *Authorized Stay*D^a Jessica RampazzoEstancia Temporal / *Authorized Stay*D^a Giulia ZanasiEstancia Temporal ERASMUS / *Authorized Stay*

Personal de apoyo / Support Staff:

D. Ángel Perea Martínez

Dª. Purificación Corchete Corchete

Técnico Especialista de Grado Medio de OPIS /
Especialist Technician OPIS

Ayudante Investigación de OPIS/ *Research Assistant OPIS*

DEPARTAMENTO DE FÍSICA MOLECULAR MOLECULAR PHYSICS

Jefa del Departamento / Head of Department:

Dra. Mª Belén Maté Naya

Científica Titular / *Tenured Scientist*

Personal Científico / Research Staff:

Prof. Dionisio Bermejo Plaza

Prof. Rafael Escribano Torres

Prof. Víctor José Herrero Ruiz de Loizaga

Prof. Salvador Montero Martín

Dr. José Luis Domenech Martínez

Dr. José María Fernández Sánchez

Dra. Isabel Tanarro Onrubia

Dr. Raúl Zósimo Martínez Torres

Dr. Juan Ortigoso Martínez

Dr. Julio Francisco Santos Gómez

Dr. Guzmán Tejeda Gala

Dr. Vicente Timón Salinero

D. Carlos Álvarez Nicolás

Dr. Miguel Jiménez Redondo

D. Germán Molpeceres de Diego

D. Denís Paredes Roibás

Profesor de Investigación / *Research Professor*

Profesor de Investigación (hasta 10 de junio) /
Research Professor (until June 10th)

Profesor de Investigación / *Research Professor*

Profesor de Investigación “Ad Honorem” / *Research Professor “Ad Honorem”*

Investigador Científico / *Research Scientist*

Investigador Científico / *Research Scientist*

Investigadora Científica / *Research Scientist*

Científico Titular / *Tenured Scientist*

Contratado Predoctoral FPI (desde 1 julio) /

PhD Fellowship (since July 1st)

Titulado Superior Contratado / *University Graduate*

Contratado Predoctoral FPI (hasta 7 marzo) /

PhD Fellowship (until March 7th)

Estudiante de Doctorado / *PhD Student*

Personal de apoyo / Support Staff:

Dª. Mª Victoria Hoyos Alfonso

D. Miguel Ángel Moreno Alba

D. Ángel Luis González Valdenebro

Técnico Superior Contratado Programa Garantía Juvenil de la C.M. (hasta el 31 marzo) / *Technician Contract (until March 31st)*

Ayudante de Investigación OPI / *Research Assistant OPIs*

Técnico Especializado de OO.PP. de Investigación / *Research Assistan OPIs*

DEPARTAMENTO DE FÍSICA MACROMOLECULAR MACROMOLECULAR PHYSICS

Jefe del Departamento / Head of Department:

Dr. Juan Francisco Vega Borrego

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

Prof. Tiberio A Ezquerro

Profesor de Investigación / *Research Professor*

Prof. Javier Martínez de Salazar Bascuñana

Profesor de Investigación / *Research Professor*

Dra. Aurora Nogales Ruíz

Investigadora Científica / *Research Scientist*

Dr. Fernando Ania García

Científico Titular / *Tenured Scientist*

Dra. María José Capitán Aranda

Científica Titular / *Tenured Scientist*

Dr. Victor Luis Cruz Cañas

Científico Titular / *Tenured Scientist*

Dra. Araceli Flores Aguilar-Amat

Científica Titular / *Tenured Scientist*

Dra. Mª Cruz García Gutiérrez

Científica Titular / *Tenured Scientist*

Dra. Amelia Linares Dos Santos

Científica Titular / *Tenured Scientist*

Prof. Francisco José Baltá Calleja

Profesor de Investigación “ad honorem” (hasta 22 octubre) / *Research Professor “ad honorem” (until October 22nd)*

Dr. Javier Ramos Díaz

Doctor contratado (16 febrero a 14 noviembre) / *Temporary hired researcher (February 16th to November 14th)*

D. Edgar Gutiérrez Fernández

Titulado superior contratado (1 de enero a 31 de julio) / *University Graduate (from January 1st to July 31st)*

Dña. Patricia Enrique Jiménez

Contrato Predoctoral FPI (hasta 29 de marzo) / *PhD Fellowship (until March 29th)*

D. Andrés Cardil Tornos

Autorización de permanencia (del 2 de septiembre al 20 de diciembre) / *Authorized stay (from September 2nd to December 20th)*

D. Daniel Chico Galán

Autorización de permanencia (del 4 de febrero al 31 de mayo) / *Authorized stay (from February 4th to May 31st)*

D. Alejandro Clemente Moral

Autorización de Permanencia (hasta el 28 de junio) / *Authorized stay (until June 28th)*

Dª. Marina Robledano Esteban

Autorización de permanencia (hasta el 30 de junio) / *Authorized stay (until June 30th)*

D. Alejandro Sastre Pérez

Autorización de permanencia (desde el 9 de octubre) / *Authorized stay (since October 9th)***Personal de apoyo / Support Staff:**

Dr. D. José Carlos Canalda Cámara

Titulado Superior Especializado OPIS / *Specialized University Graduate*

Dra. Virginia Souza-Egipsy Sánchez

Titulado Superior Especializado OPIS / *Specialized University Graduate*

UNIDAD DE GESTIÓN ECONÓMICA-ADMINISTRATIVA FINANCES AND ADMINISTRATION

Dª. Marta Mª Granja Perdices	C. de Gestión Admon. del Estado (hasta 14 febrero) /
Dª Mª Isabel Llerena de Frutos	C. Técnico Especializado de OO.PP. de Investigación (desde 15 febrero) / <i>Technical Specialized OPIs (since February 15th)</i>
Dª. Rosario Carrasco Nicolás	Ayudante de Investigación de OPIS / <i>Research Assistant OPIs</i>
Dª. Purificación Díez Rodríguez	C. Gral. Administrativo. Admon. del Estado / <i>General Administration</i>
Dª. Alicia Fernández Clavero	Ayudante de Investigación OPIS / <i>Research Assistant OPIs</i>
Dª. Ana María García Arribas	Ayudante de Investigación OPIS / <i>Research Assistant OPIs</i>
Dª. Carmen García Collado	Ayudante de Investigación OPIS / <i>Research Assistant OPIs</i>
Dª. Beatriz Gil Sánchez	C. Gral. Admvo. Admon. del Estado / <i>General Administration</i>
Dª. Isabel Lombán Botello	Auxiliar OO.AA. / <i>Auxiliary OO.AA.</i>
Dª Concepción Nieto Serrano	C.Técnicos Auxiliares Informática Admon. del Estado (desde 3 junio) / <i>IT Technical Auxiliaries (since June 3rd)</i>

SERVICIOS DEL CENTRO DE FÍSICA MIGUEL ANTONIO CATALÁN CENTRAL SERVICES

ALMACÉN / WAREHOUSE

Dª. Clara Isabel Cardeñosa García	C. Gral Admvo. Admon. del Estado / <i>General Administration</i>
D. José Manuel Segura González	C. Auxiliares Postales de Telecomunicaciones / <i>Auxiliary Telec.</i>

BIBLIOTECA / LIBRARY

Dª. Flora Granizo Barrena	Técnico Biblioteca y Documentación / <i>Library and Doc. Specialist</i>
---------------------------	---

CONSERJERÍA / RECEPTION

Dª. Soledad Moreno Zambrano	Ayudante Gestión y Servicios Comunes / <i>Common Services Assistant</i>
Dª. Cristina Peco Marco	Ayudante Gestión y Servicios Comunes / <i>Common Services Assistant</i>

INFORMÁTICA / INFORMATICS AND COMPUTER SERVICES

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

MANTENIMIENTO / MAINTENANCE

D. Fernando Pueyo García	Técnico Especialista Grado Medio de OPIS / <i>Technical Specialist OPIs</i>
D. Alberto Flórez Gómez	Oficial Actividades Técnicas y Profesionales (desde 1 diciembre)

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:

- Gravitación y Cosmología.
- 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.
- Cosmología Cuántica de Lazos.
- Teoría Cuántica de Campos en Espaciotiempos Curvos.
- Gravedad no-local.
- Espaciotiempos multiescala.
- Ondas gravitacionales (Consorcio LISA).
- Teorías de campos y geometría.
- Combinatoria y teoría de números.
- Sistemas mesoscópicos y fuertemente correlacionados.
- Modelos integrables cuánticos.
- 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.
- Espectroscopía 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.
- Formalismo hamiltoniano geométrico.
- Teoría cuántica de campos en espacios curvos.
- Métodos de campo medio autoconsistente.
- Métodos de cálculo eficiente para problemas variacionales semidefinidos positivos.
- 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

Durante 2019, el grupo de Gravitación y Cosmología ha progresado en la implementación del enfoque híbrido para la cuantificación de sistemas cosmológicos con perturbaciones primordiales en el marco del formalismo de la gravedad cuántica de lazos. Uno de los pasos principales en este enfoque es la cuantización de las perturbaciones de los campos mediante una representación de Fock. Hemos investigado una posible forma de determinar esta representación de Fock para backgrounds que corresponden a universos planos, homogéneos e isótropos. En más detalle, hemos explorado la posibilidad de seleccionar un estado de vacío natural para las perturbaciones cosmológicas invariantes de gauge, tanto escalares como tensoriales, en el contexto de la cosmología cuántica híbrida mediante la identificación de aquellas variables para la descripción de las perturbaciones que muestran un comportamiento dinámico adaptado de una manera específica a la evolución de la totalidad de la cosmología estudiada. Hemos utilizado una formulación canónica de todo el sistema cosmológico (formado por la geometría de background y las perturbaciones) en el que los grados de libertad

perturbativos invariantes de gauge se identifican como variables canónicas. Al introducir en estas perturbaciones transformaciones canónicas lineales dependientes del background que respetan las simetrías espaciales del background y completar esas transformaciones canónicas para todo el sistema, hemos podido caracterizar una colección genérica de variables de creación y destrucción que obedecen la dinámica dictada por una respectiva colección de hamiltonianos. A continuación, hemos impuesto que tales hamiltonianos no posean términos de auto-interacción, de modo que, en una representación de Fock con un orden normal, actúen diagonalmente sobre la base de estados de n partículas. Esto conduce a una ecuación diferencial parcial de primer orden semilineal con respecto al background para los coeficientes que definen las variables de creación y destrucción de los modos de Fourier, así como a una caracterización ultravioleta muy precisa de las mismas. Dicha ecuación de primer orden contiene, en la parte imaginaria de sus soluciones complejas, la complicada ecuación de campo de segundo orden que típicamente surge para la frecuencia dependiente del tiempo de las perturbaciones en el contexto de la teoría cuántica de campos sobre espacio-tiempos curvos. Hemos comprobado que el conocimiento asintótico adquirido permite seleccionar el vacío estándar en los espacio-tiempos de Minkowski y de Sitter. Además, hemos discutido la relación de nuestro vacío y los llamados vacíos adiabáticos, y comprobado que nuestra caracterización asintótica de variables con un hamiltoniano diagonal muestra las propiedades que serían deseables para un estado adiabático de orden infinito.

Nuestro procedimiento para seleccionar un vacío cuántico único para las perturbaciones en el contexto de la cosmología cuántica de lazos híbrida también se ha extendido al caso de un campo de Dirac, mínimamente acoplado al fondo cosmológico y tratado como una perturbación. De esta manera, hemos demostrado que es posible obtener una ecuación de Schrödinger para los grados de libertad fermiónicos que conducen a relaciones de Heisenberg y transformaciones de evolución de Bogoliubov asintóticamente diagonales, sin divergencias en el Hamiltoniano asociado, definido con orden normal. Para este campo de Dirac, también hemos explorado en detalle la relación entre la representación de Fock seleccionada por un criterio de evolución dinámica unitaria (introducida en el pasado por nosotros y más débil que el requisito de diagonalización asintótica) y aquellas construidas con el esquema adiabático familiar de la teoría cuántica de campos en espacio-tiempos curvos. Hemos encontrado que todos los estados adiabáticos pertenecen a la familia de representaciones de Fock que permiten una evolución cuántica implementable de forma unitaria (aunque lo contrario no es generalmente cierto). En particular, esta unitariedad de la dinámica asegura que los vacíos definidos con condiciones iniciales adiabáticas en diferentes momentos son unitariamente equivalentes. También hemos visto que, para todos los órdenes adiabáticos distintos de cero, estas condiciones iniciales permiten la definición de operadores de creación y destrucción para el campo de Dirac que conducen a una backreaction inversa finita en la ligadura hamiltoniana cuántica y a un operador hamiltoniano fermiónico que está bien definido en el span de los estados de n -partículas/antipartículas, en el contexto de la cosmología cuántica híbrida.

Finalmente, también hemos investigado nuevas propuestas para la regularización de la ligadura hamiltoniana en la cosmología cuántica de lazos, centrando nuestra atención en una regularización sugerida por Dapor y Liegener. Hemos cuantizado el Hamiltoniano resultante siguiendo una prescripción de cosmología propuesta por nuestro grupo en años anteriores. Para este efecto, primero hemos regularizado las partes euclídea y lorentziana de la ligadura hamiltoniana por separado en el caso de una cosmología de Bianchi de tipo I. Esto nos ha permitido identificar una simetrización natural del hamiltoniano que resulta evidente en escenarios anisotrópicos. Preservando esta simetrización en regímenes isótropos, hemos determinado la ligadura hamiltoniana correspondiente a una cosmología homogénea e isótropa, que luego hemos procedido a cuantizar. Hemos calculado la acción de este operador hamiltoniano en la base propia del volumen y hemos demostrado que toma la forma de una ecuación en diferencias de cuarto orden, en contraste con lo que ocurre en cosmología cuántica de lazos estándar, donde se sabe que es de segundo orden. Hemos investigado los sectores de superselección de nuestro operador de ligadura, demostrando que son semirredes con soporte solo en el semieje positivo o negativo, dependiendo de la orientación de la tríada. Sorprendentemente, el desacoplo entre semiejes nos permite escribir una expresión cerrada para las funciones propias generalizadas de la parte geométrica de la ligadura. Esta expresión está totalmente determinada por los valores en los dos puntos de la semirred que están más cerca del origen, es decir, las dos contribuciones con el volumen propio más pequeño. Esto difiere claramente de la situación encontrada para el Hamiltoniano estándar de cosmología cuántica de lazos, donde solo el valor más pequeño es libre.

También hemos demostrado que los detectores uniformemente acelerados pueden presentar características térmicas incluso cuando la condición KMS no se satisface. Estas características incluyen balance detallado y una respuesta planckiana. Extraemos las condiciones necesarias y suficientes para que la respuesta sea térmica en el límite adiabático. Proporcionamos un modelo sólido para analizar sin ambigüedades la robustez del efecto Unruh frente a deformaciones de las teorías cuánticas de campos (quizá con violaciones Lorentz). También hemos estudiado la magnitud de los efectos de gravedad semicásica cerca de la formación de un horizonte de agujero negro. Hemos calculado el tensor de energía-momento renormalizado y la función de temperatura efectiva. En particular, hemos analizado las consecuencias de una oscilación justo sobre el radio de Schwarzschild, un acercamiento monótono a este en tiempo infinito y un cruce a diferentes velocidades. Para colapsos con evolución relativista general, recuperamos el paradigma estándar con diminutos efectos semicásicos. En regímenes más generales, obtenemos una variedad de efectos: desde la emisión de radiación similar a la de Hawking sin formación de horizontes hasta grandes valores del tensor de energía-momento renormalizado vinculados al vacío de Boulware.

El grupo ha continuado trabajando sobre los aspectos geométricos de la formulación hamiltoniana de sistemas lagrangianos singulares, en particular aquellos relevantes para el estudio clásico de teorías de tipo gravitatorio y su cuantización. En este momento se está prestando mucha atención al estudio de teorías de campos definidas en regiones espaciales con fronteras. Estos modelos son relevantes en todas las ramas de la física, ya que las fronteras son muy importantes en los sistemas físicos reales. En el contexto de la física gravitacional, por ejemplo, aparecen como horizontes en los agujeros negros y juegan un papel muy importante en los modelos holográficos. También son de suma importancia para la física teórica de la materia condensada. La presencia de fronteras hace que sea difícil obtener las formulaciones hamiltonianas correctas con los métodos estándar (bastante formales) utilizados hasta ahora. Uno de los problemas es la dificultad para trabajar con la estructura simpléctica canónica cuando hay fronteras. La forma obvia de salir de este tipo de situación es utilizar métodos geométricos. Durante los últimos años, los miembros del grupo (Barbero, Margalef y Villaseñor) han adaptado el llamado método GNH para el tratamiento hamiltoniano de las teorías de campos con fronteras. Durante el año 2019, hemos desarrollado, en colaboración con el Dr. Bogar Díaz Jiménez, una implementación geométrica práctica del algoritmo de Dirac de forma que se evitan de manera efectiva los problemas que generalmente surgen al considerar fronteras. Una de las razones por las que nuestro método funciona tan bien es el hecho de que la estabilidad dinámica de las ligaduras hamiltonianas se interpreta geométricamente como una condición de tangencia de los campos vectoriales hamiltonianos en el espacio de fases. Esto nos permite evitar el uso explícito de los corchetes de Poisson más allá de la determinación inicial de estos campos vectoriales hamiltonianos, eliminando así algunas de las dificultades habituales. Como aplicación inicial del nuevo método, hemos estudiado una rica familia de acciones gravitatorias en una variedad de cuatro dimensiones con frontera y hemos mostrado cómo la dinámica en el bulk (que admite interpretación dinámica simple ya que viene dada por las ecuaciones de campo del modelo de Husain-Kuchar) interactúa con la dinámica en la frontera (dada por la extensión propuesta por Baekler y Mielke de la relatividad general en 2 + 1 dimensiones). En este momento estamos completando el estudio de varias teorías de campos interesantes con nuestros nuevos métodos hamiltonianos, entre ellas la versión parametrizada de una teoría de Maxwell-Chern-Simons para k-formas en espacio-tiempos de dimensión impar con fronteras y la versión parametrizada de la gravedad unimodular en la formulación de Ashtekar.

Durante el último año, los miembros del grupo (Barbero y Villaseñor), en colaboración con el Dr. Jesús Salas (UC3m) y el Dr. Juan Margalef-Bentabol (Penn State University) han continuado su trabajo en combinatoria y temas relacionados, en particular el uso de métodos asintóticos para el estudio y caracterización de las propiedades de los conjuntos de ceros de familias de polinomios (en particular, los polinomios de Appell). Este trabajo es un subproducto interesante del realizado en el pasado sobre el estudio de la entropía de los agujeros negros y el operador del área en Gravedad Cuántica de Lazos.

En el contexto de la gravedad no-local, hemos aclarado por primera vez la estructura del espectro no-perturbativo de la teoría, demostrando que el graviton es el único grado de libertad físico que propaga en espaciotiempos planos o con escalar de Ricci nulo (también se demostró la estabilidad de estos espaciotiempos como soluciones exactas). Otros grados de libertad, nuevos respecto a los de la relatividad general, pueden propagar en ciertos fondos curvos. Ninguno de los modos fantasma de las teorías gravitatorias locales de orden superior está presente en el espectro físico, quedando así garantizada la unitariedad de la teoría no-local a nivel árbol.

Este año marca la entrada del grupo en el Consorcio LISA, específicamente en los Cosmology Working Group y el Fundamental Physics Working Group. La principal actividad científica relacionada con este experimento espacial, cuyo inicio está previsto para 2034, fue el estudio de la distancia de luminosidad de las ondas gravitacionales de origen astrofísico en teorías de gravedad modificada o de gravedad cuántica. Es la primera vez que se aborda el problema de cómo modelos tipo DHOST o correcciones de gravedad cuántica pueden distorsionar la distancia de luminosidad y con qué tamaño del efecto. Con los miembros del LISA Cosmology Working Group, hemos estudiado dichos efectos tanto a nivel teórico como en simulaciones numéricas utilizando catálogos simulados de sirenas estándar detectables por LISA. El resultado, publicado en un artículo oficial de la Colaboración, es que sí existen algunos modelos cuyas correcciones pueden llegar al umbral de sensitividad del instrumento. En estas teorías más allá de la gravedad de Einstein, las ondas gravitacionales propagan de una forma característica discriminable respecto a la física ordinaria. En otros dos artículos no pertenecientes a LISA, pero en colaboración con miembros de LISA y LIGO, hemos explorado estos detalles en el ámbito de una amplia clase de teorías de gravedad cuántica.

FÍSICA NUCLEAR TEÓRICA

Desintegraciones débiles en núcleos superpesados

Continuando con la línea de investigación enfocada al estudio de la desintegración beta en el núcleo atómico, durante el pasado año se han estudiado las vidas medias en núcleos superpesados producidos en reacciones de fusión caliente con el objeto de comparar las tasas de desintegración relativas entre los distintos modos de desintegración alfa y beta y así abrir la posibilidad de identificar nuevos elementos que no pertenecen a las cadenas originales de desintegración alfa.

La búsqueda de nuevas regiones de estabilidad nuclear en núcleos superpesados es una fructífera línea de investigación que ha conducido al descubrimiento de nuevos elementos. Teóricamente existen predicciones de 'islas de estabilidad' en núcleos muy pesados que están relacionadas con cierres de capas o subcapas para determinado número de protones o neutrones, aunque estas predicciones resultan ser muy dependientes de las interacciones utilizadas. Paralelamente, se han utilizado diferentes estrategias experimentales para alcanzar esos núcleos superpesados predichos teóricamente. En un primer momento se utilizaron reacciones de fusión fría para sintetizar elementos con $Z=107-112$ pero resultaron poco exitosas para generar elementos aún más pesados. Una segunda estrategia (reacciones de fusión caliente) consistió en utilizar blancos y proyectiles más asimétricos que resultó exitosa para producir elementos $Z=112-118$. Los núcleos así producidos sufren principalmente una cadena de desintegraciones alfa para finalizar en una fisión nuclear. La identificación de esas cadenas de desintegración alfa asociadas lleva a poder establecer el núcleo original producido en la reacción. En este contexto es de especial importancia saber si los productos intermedios de desintegración presentan canales de desintegración beta o captura electrónica con vidas medias comparables a la desintegración alfa porque de ser este el caso abriría la posibilidad a nuevas ramas de desintegración que conduzcan a elementos superpesados en origen distintos a los esperados mediante únicamente desintegraciones alfa.

El estudio teórico de la desintegración beta y captura electrónica de núcleos superpesados se había realizado hasta la fecha únicamente mediante modelos fenomenológicos de escasa verosimilitud. En nuestro trabajo realizamos por primera vez cálculos microscópicos de estas vidas medias con fuerzas efectivas nucleón-nucleón tratadas mediante métodos autoconsistentes de Hartree-Fock deformado y correlaciones de apareamiento. Los resultados indican que, en general, las desintegraciones alfa son órdenes de magnitud más rápidas que las correspondientes desintegraciones beta y por tanto los análisis en términos únicamente de cadenas de desintegración alfa son válidos en primera instancia.

Núcleos como sistemas de tres cuerpos con interacciones de campo medio

Un aspecto importante de la tarea llevada a cabo durante estos últimos meses ha sido el desarrollo un nuevo método que permite construir la interacción entre clusters de partículas a partir de un cálculo estándar de campo medio. Más concretamente, la idea es tener en cuenta la estructura del core para construir una interacción de campo medio que es la que sienten los nucleones del halo. De este modo se combinan los grados de libertad de pocos y muchos cuerpos, y desarrollamos una herramienta computacional eficiente aplicable a estados ligados y del continuo, y que en principio es aplicable a distintos campos de la física. Formulamos pues un modelo de tres cuerpos autoconsistente para describir un core rodeado por dos nucleones de valencia, en el que el core se trata mediante una aproximación de campo medio con una interacción de Skyrme efectiva. En un primer cálculo, este nuevo método ha sido aplicado al ^{26}O (^{24}O más dos neutrones), siendo capaces de reproducir tanto los datos experimentales existentes como los resultados obtenidos con otros modelos fenomenológicos con más parámetros. Se obtiene también que la desintegración del estado fundamental se corresponde con una desintegración directa en el continuo, sin contribución de desintegración secuencial a través de la resonancia $d_{3/2}$ del ^{25}O , resonancia que se obtiene también del cálculo numérico, y cuya energía reproduce la información experimental correspondiente. Igualmente hemos estudiado los procesos de captura radiativa de dos protones a través del ^{68}Se , analizando el carácter directo o secuencial de dicha captura. Igualmente, se ha empleado el núcleo ^{70}Ca para investigar como los halos de neutrones y los estados de Efimov surgen de manera natural cuando para un determinado isótopo nos acercamos a la línea de goteo de neutrones. Más recientemente hemos investigado la aplicabilidad del método a núcleos próximos al valle de estabilidad, comprobando como la estructura *clusterizada* del sistema no está impuesta por el modelo, sino que surge de forma natural al aproximarnos a las *driplines* de protones o neutrones.

Confinamiento de sistemas de dos y tres partículas

A lo largo de este año hemos investigado el comportamiento de sistemas de dos y tres cuerpos cuando la dimensión del espacio en el que se mueven varía de manera continua de tres (3D) a dos (2D) y a una (1D) dimensión. Esto equivale a confinar las partículas en un espacio progresivamente más estrecho, de tal manera que al alcanzar anchura cero las partículas se mueven en 2D o en 1D. En la práctica esto puede llevarse a cabo mediante la existencia un potencial confinante externo. En concreto, en nuestros cálculos lo hemos hecho mediante un potencial de oscilador armónico a lo largo de la coordenada z (para el proceso 3D a 2D) o a lo largo de la coordenada perpendicular (para confinamiento de 3D a 1D).

Para sistemas de dos cuerpos la implementación numérica del potencial externo es sencilla. No es así para sistemas de tres cuerpos, ya que, aunque conceptualmente el problema es idéntico, en la práctica las dificultades numéricas se multiplican para valores grandes de la frecuencia del potencial de oscilador. De hecho, para muy grandes frecuencias, al aproximarse a 2D o 1D, el método es poco eficiente. Por este motivo, en nuestro trabajo proponemos implementar el confinamiento de las partículas no a través de un potencial externo, sino introduciendo la dimensión d como un parámetro en la ecuación de Schrödinger (o Faddeev). La dimensión puede entonces variar de manera continua, tomando valores no enteros dentro del rango $2 \leq d \leq 3$ o $1 \leq d \leq 3$.

El propósito de nuestro trabajo es por tanto encontrar la conexión entre los dos métodos de confinamiento mencionados. Es necesario determinar la equivalencia entre un valor dado del parámetro de oscilador y el valor no entero de la dimensión que describa la misma situación física. Una vez hecho esto será entonces posible, usando dimensiones no enteras, investigar por ejemplo el comportamiento de los estados de Efimov en distintos sistemas, investigando en particular cómo estos estados desaparecen a medida que se incrementa el confinamiento de las partículas.

TEORÍA DE LA MATERIA CONDENSADA

Semimetales topológicos en campos externos

Los materiales topológicos han atraído mucho interés en la última década ya que presentan nuevos fenómenos muy fundamentales y grandes promesas para aplicaciones tecnológicas de gran calado. Los sistemas sin brecha de energía forman la familia de los semimetales topológicos donde las bandas de conducción y valencia solo se tocan en conjuntos de puntos de medida nula en la zona de Brillouin. Los semimetales topológicos de Weyl y de Dirac son fases de la materia tridimensionales en los que estos puntos de contacto aislados están protegidos por la simetría y la topología. Cerca de los nodos, la relación de dispersión es un análogo tridimensional de la del grafeno y se puede describir con versión anisotrópicas de las ecuaciones de Dirac o de Weyl. Sus cuasipartículas de baja energía se comportan como fermiones relativistas. Una de las manifestaciones principales de las propiedades topológicas es la presencia de estados de superficie en regiones compactas del espacio de momentos. Comprender el efecto de campos externos en las fases topológicas y las propiedades de transporte es un campo de gran interés tanto desde el punto de vista de primeros principios como desde la perspectiva de posibles aplicaciones. Hemos estudiado el efecto de campos externos, eléctricos y magnéticos, en la manifestación de la topología más directa, los estados de superficie. En el caso de un campo eléctrico aplicado perpendicularmente a la superficie de una película delgada de un semimetal topológico, hemos derivado expresiones analíticas basadas en teoría de perturbaciones que describen la modificación de la velocidad de Fermi y la posición de los nodos como función de la intensidad del campo eléctrico. Utilizando cálculos numéricos detallados, hemos confirmado nuestras predicciones y las hemos extendido fuera del régimen de validez de la teoría de perturbaciones. También hemos estudiado los niveles de Landau de semimetales de Weyl y Dirac cuando se aplica un campo magnético. La anisotropía de estos materiales tiene como consecuencia un comportamiento diferente según la dirección de aplicación del campo magnético. Hemos identificado diferentes regímenes de parámetros para la respuesta de los semimetales topológicos bajo un campo magnético.

Transporte electrónico en bicapas de grafeno giradas

Durante el año 2019 hemos desarrollado un marco teórico para explicar el origen de la fase metálica exótica encontrada en bicapas de grafeno giradas por el grupo de Pablo Jarillo-Herrero en el MIT. La principal característica de tal fase es la dependencia lineal en temperatura de la resistividad, por encima de la fase superconductora observada a medio llenado de la superred de moaré. Mientras que es común asumir que la interacción electrón-fonón puede ser responsable de tal comportamiento anómalo, se ha llegado a reconocer que en el fondo los fonones no pueden explicar la dependencia lineal hasta las temperaturas más bajas alcanzadas en el experimento (~ 0.5 K). Nuestra propuesta ha servido para resolver esta inconsistencia, dando una explicación que está enteramente basada en la interacción electrón-electrón.

La observación clave de nuestra propuesta es que las bandas de baja energía de las bicapas de grafeno giradas poseen en el ángulo mágico dos características propias que dictan las propiedades de transporte. Ellas son la presencia de los nodos de Dirac en el punto de neutralidad de carga y, por otra parte, un conjunto de puntos de silla que se encuentran cerca del nivel de Fermi a medio llenado de las bandas de valencia y de conducción de más baja energía. Hemos demostrado que la desintegración de las cuasipartículas de electrón en la región de dispersión plana de los puntos de silla, al igual que la de las de mayor energía (que se encuentran ya en el cono de Dirac por debajo de los nodos en el punto K) puede explicar la dependencia lineal en temperatura de la resistividad. El origen del comportamiento lineal es sin embargo diferente en los dos regímenes, dando lugar a la aparición de un cambio de pendiente que es de hecho consistente con las observaciones experimentales del grupo del MIT.

Además, hemos argumentado que la dependencia lineal de la resistividad tiene que ser sólo una de las muchas facetas reflejando la desviación de las bicapas de grafeno giradas con respecto a la imagen convencional del líquido de Fermi. La razón de tal comportamiento anómalo se encuentra en la dependencia lineal en energía de las excitaciones electrón-hueco a través de la línea de Fermi en la región plana de los puntos de silla de la dispersión electrónica. Nuestro marco teórico se puede entender por tanto como una realización concreta del paradigma de líquido de Fermi marginal, que fue propuesto fenomenológicamente hace muchos años para describir la fase normal de los óxidos de cobre superconductores de alta temperatura. Hemos concluido que tal comportamiento no convencional debería verse reflejado en otras características observables, como la dependencia lineal en energía de la razón de desintegración de las cuasipartículas de electrón, o la dependencia anómala en temperatura del calor específico y la conductividad térmica.

Teoría variacional de la matriz densidad reducida para sistemas fuertemente correlacionados

Uno de los métodos variacionales para el estudio de sistemas fuertemente correlacionados menos explorados es la teoría variacional de la matriz densidad reducida (VRDM). Este método parece ser una aproximación promisoria para tratar la dinámica compleja de sistemas cuánticos de muchos cuerpos con un bajo coste computacional.

Recientemente, implementando un código de programación semidefinida, obtuvimos muy buenos resultados numéricos para modelos de pairing atractivos. Como continuación de este trabajo, hemos desarrollado un código para la determinación variacional de la matriz densidad reducida de dos cuerpos en el espacio de N electrones, restringido a

configuraciones de ocupaciones dobles e imponiendo condiciones de N-representabilidad de hasta cuatro partículas. Estas condiciones son necesarias para que la matriz densidad reducida de dos cuerpos sea N-representable. Presentamos el formalismo en términos de bosones hard-core que viven en un espacio de senioridad 0. Esto incluye problemas de pairing fermiónico y magnetismo cuántico. Estudiamos la precisión del método en la cadena XXZ de espín $\frac{1}{2}$ como modelo representativo de sistema fuertemente correlacionado dentro de la clase de Hamiltonianos de senioridad 0. Sin embargo, este formalismo puede ser utilizado para la descripción de atómico o moleculares de N-electrones en la aproximación de configuraciones doblemente ocupadas. Presentamos energías del estado fundamental, matrices densidad reducida de dos partículas y correlaciones para todo el rango de parámetros del Hamiltoniano. Los resultados obtenidos con condiciones N-representabilidad de 4 partículas muestran una mejora significativa respecto de resultados previos con condiciones de 2 y 3 partículas al precio de un aumento asequible del coste computacional.

Modelos integrables para sistemas de átomos fríos

Desarrollamos un modelo exactamente soluble para Sistema bosónicos con interacción en onda p y establecimos su diagrama de fases para interacciones atractivas. Analizamos en profundidad el caso de mezclas balanceadas con masas iguales y cero momento de centro de masa. Sin embargo, el caso más general de masas distintas y momento de centro de masas finito está contenido en la solución exacta. La solución exacta para sistemas finitos y también en el límite termodinámico, aunque es similar al problema fermiónico, tiene diferencias significativas a pesar de que la transición de fase es de tercer orden en ambos casos En el caso fermiónico esta transición separa dos fases con gap y tiene carácter topológico. En el caso bosónico, una de las fases no tiene gap y muestra un condensado fragmentado con ocupación macroscópica de las dos especies en el par de momentos ($k, -k$) menor, mientras que la otra fase tiene gap y se comporta como condensado de pares bosónicos superfluidos. Para sistemas fermiónicos la transición tiene lugar en el punto de Read-Green con un parión en energía 0 y todos los otros en energías reales negativas, mientras que en sistemas bosónicos esta transición ocurre en el punto equivalente a Moore-Read con todo los pariones colapsando en energía 0. En este punto, la función de onda exacta es un condensado de pares con amplitudes fijadas por las energías de partícula independiente. Motivados por predicciones teóricas, experimentos recientes descubrieron un líquido cuántico ultradiluido en sistemas de átomos bosónicos fríos. ¿Se puede obtener una fase líquida a partir de un sistema de Bose onda p? Esta pregunta fue recientemente tratada y la respuesta fue afirmativa para un modelo particular. Nuestra fase de Bose superfluida representa un candidato posible para la fase de líquido de Bose. Por lo tanto, la interacción de pairing onda p proporciona un mecanismo efectivo para su estabilización. Aunque el gap finito impide su expansión en geometrías finitas, se necesitan más estudios con potenciales atrapantes para identificar una gota de líquido cuántico autoligada. Por el lado experimental, es crucial disponer del espectro de excitaciones para comparar con nuestras predicciones teóricas.

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

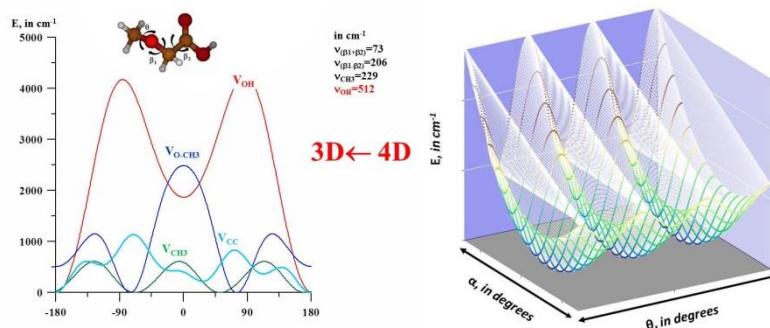
Durante 2019, el grupo ha desarrollado investigación correspondiente a los proyectos **FIS2016-76418-P**, **COOPB20364** y **ANR-14-CE33-0013** cuyo objetivo fundamental es el estudio de especies moleculares detectables en fuentes astrofísicas gaseosas y en la atmósfera terrestre empleando métodos teóricos de la física molecular. Algunas de estas especies, se clasifican como Compuesto Volátiles Orgánicos (VOC) y se consideran importantes contaminantes atmosféricos.

Especial atención se concede las especies no-rígidas (MNR) que presentan varios mínimos o confórmeros en la superficie de energía potencial. Los confórmeros, a diferencia de los isómeros, se interconvierten mediante movimientos vibracionales de gran amplitud sin romper o crear enlaces. El análisis de sus espectros muy complejos requiere modelos teóricos específicos que asuman la no-rigidez como los que se han desarrollado en el grupo y están integrados en el programa ENEDIM.

El objetivo general de FIS2016-76418-P es la caracterización espectroscópica a bajas temperaturas de especies moleculares no-rígidas, prebióticas y de interés astrofísico, patiendo de métodos ab initio altamente correlacionados. También es objetivo por su relevancia astrofísica, el estudio de cadenas carbonadas tipo C_n (n=3-8) y tipo C_nH (n=3-6), así como de sus aniones y cationes. Se priorizaran las especies insuficientemente caracterizadas a nivel laboratorio, enfatizando en los aspectos más difíciles de interpretar o abordar experimentalmente. Interesan variedades isotópicas que contengan isótopos cosmológicamente abundantes.

El estudio de especies MNR y VOC es también objetivo del proyecto COOPB20364 que además atiende a los radicales orgánicos existentes en fuentes gaseosas, a los procesos de fotodisociación y formación de dichas especies y a las interacciones gas-sólido. En el proyecto participan grupos de las Universidades Mohammed V de Rabat, y de Túnez el Manar y La Manouba en Túnez.

En cuanto al proyecto ANR-14-CE33-0013 (Anion Cos Chem), que se coordina desde la Universidad de Rennes y en el que intervienen varias Universidades francesas (Universidades de Bordeaux y de Le Havre, Observatoires de París y de Grenoble), la participación del grupo se centra los cálculos colisionales y en la caracterización espectroscópicas de cadenas carbonadas de carga negativa.



Durante 2019, se han estudiado los espectros a bajas temperaturas del acetil isocianato y de sus isómeros ciano-formiato de metilo y acetil cianato, así como las propiedades espectroscópicas del radical $\text{CH}_3\text{-O-CH}_2$ y de los isómeros del cianuro de propilo. Una nueva caracterizaciónpectral en la región THz de las variedades isotópicas CH_3OCH_3 and $^{13}\text{CH}_3\text{OCH}_3$ del dimetil eter se ha llevado a cabo mediante espectroscopía Raman a distintas temperaturas y cálculos ab initio, en colaboración con investigadores del Departamento de Física Molecular. Este trabajo ha permitido reasignar las bandas correspondientes a los sobretonos torsionales. Se han realizado estudios de la formación en fase gaseosa de los isómeros del formiato de metilo, cianuro de propilo y de la familia $\text{H}_2\text{C}_3\text{O}$.

Respecto a las cadenas carbonadas, se ha llevado a cabo un trabajo intensivo de los sistemas C_3H and C_5H (formas neutras y con carga). El estudio confirma la estabilidad preponderante de las formas lineales y de las especies que contiene ciclos de tres carbonos. Se han calculado parámetros colisionales a bajas temperaturas de sistema $\text{C}_4\text{H}^+ + \text{H}_2$.

Finalmente, se han estudiado la fotodisociación del radical etilo mediante técnicas experimentales y teóricas y la adsorción de CH_4 , SF_6 y H_2O in ZIFs

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

LÍNEAS DE INVESTIGACIÓN:

- Física Nuclear Experimental.
- Estudio de estructura nuclear a energías intermedias.
- Estudio de estados nucleares excitados y resonantes.
- Estudio de la estructura nuclear en reacciones con núcleos exóticos y estables a energías bajas, medias y relativistas.
- Simulaciones por computación usando la herramienta FairRoot para experimentos de Física Nuclear.
- Sistemas carentes de orden de largo alcance.
- Instrumentación avanzada.
- Bionanoespectroscopía.
- Detección molecular basada en técnicas ópticas intensificadas por nanoestructuras.
- Aplicación de técnicas espectroscópicas al diseño, desarrollo y durabilidad de los materiales artificiales de construcción.
- Estudio mediante SERS de las interacciones aditivo/ligante.
- Diseño de materiales artificiales de construcción mediante el uso de materiales de reciclado.
- Diseño de sensores SERS con base en silicatos cárnicos.
- Estudio y caracterización mediante técnicas portátiles de materiales del Patrimonio Histórico antiguo y moderno.
- Nano-Fotónica.
- Plasmónica y Metamateriales.

SUBLÍNEAS DE INVESTIGACIÓN:

- Caracterización de la estructura nuclear mediante reacciones elásticas y de ruptura, así como a través de la desintegración beta.
- Estudio del mecanismo de ruptura de estados excitados en múltiples partículas.
- Estudio de las propiedades estructurales de núcleos en reacciones a energías relativísticas.
- I+D de centelladores para el calorímetro CALIFA para el experimento R3B@FAIR.
- Medida de momentos magnéticos en núcleos exóticos mediante haces de iones radiactivos.
- Instrumentación nuclear.
- Métodos computacionales en Física Nuclear experimental (R3BRoot).
- Herramientas de análisis de datos (Root).
- Experimentación en Física Nuclear Experimental para FAIR.
- Comportamiento físico a nano-escalas.
- Estructura y dinámica microscópica de materia condensada desordenada.
- Desarrollo de instrumentación avanzada para fuentes de neutrones.
- Resonancias plasmónicas en nanoestructuras metálicas (nanoantenas).
- Metamateriales con materiales dieléctricos de alto-índice.
- Metamateriales metálicos transparentes.
- Nanofotónica de nanohilos semiconductores.
- Plasmónica topológica.
- Fabricación y funcionalización de nanoestructuras.
- Desarrollo de sensores moleculares basados en espectroscopías plasmónicas.
- Interacción Biomolécula/Nanoestructura.
- Hipertermia.

TÉCNICAS UTILIZADAS:

- 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.
- Espectroscopia Gamma.

- Análisis de experimentos en Física Nuclear Experimental.
- Métodos computacionales.
- Simulación Numérica.
- Dispersión de neutrones.
- Medidas de Adsorción de gases.
- Física Teórica y Matemática.
- Espectroscopía Raman (Micro-Raman, Raman portátil).
- Espectroscopía Infrarroja por transformadas de Fourier (FT-IR).
- Microscopía Electrónica de Rastreo SEM/EDX.
- Difracción de Rayos X (DRX).
- Análisis Térmico Diferencial-Termogravimetría(ATD/TG).

LABOR INVESTIGADORA:

PROYECTO PRONTO-CM (J.A. Briz, M.J.G. Borge, O. Tengblad, E. Nácher, A. Perea)

En el marco del proyecto PRONTO-CM, el grupo está realizando tareas de I+D para desarrollar un prototipo de escáner de Tomografía Computerizada con protones (pCT) empleando instrumentación nuclear. Para mediados de 2020 habrá dos nuevas instalaciones de protonterapia operando en España: una en la clínica Quirónsalud y otra en la Clínica Universidad de Navarra (CUN), ambas en Madrid. Con la llegada de esta nueva técnica terapéutica, nuevos desarrollos y mejoras son necesarios para explotar por completo su potencial. Uno de ellos es la sustitución de la técnica de Tomografía Computerizada por rayos X (xCT) que actualmente se usa para la elaboración de los planes de tratamiento por pCT. Esto conllevaría una reducción en la incertidumbre en el rango de los protones desde un valor actual de un 3 % aproximadamente hasta por debajo del 1 % clínicamente deseable. Por este motivo actualmente se han concentrado grandes esfuerzos en el desarrollo de un escáner pCT para su aplicación clínica. En esta dirección, el grupo de Física Nuclear Experimental propone un nuevo prototipo de escáner para pCT.

En este proyecto, se ha trabajado intensamente en el laboratorio del CSIC durante el año 2019 con el fin de poner a punto la electrónica y detectores necesarios para realizar un experimento con haz de protones que fue realizado en el mes de junio en las instalaciones del Centro de MicroAnálisis de Materiales (CMAM) en Madrid. El objetivo era probar un prototipo de escáner para pCT compuesto por dos detectores de silicio doblemente segmentados en bandas (DSSDs por sus siglas en inglés) empleados para trazar las trayectorias de protones. Un haz de 10 MeV (máxima energía alcanzable en la instalación del CMAM) se utilizó para obtener imágenes de muestras planas (bidimensionales) con patrones espaciales sencillos de diferentes materiales y espesores con el objetivo de estudiar la resolución espacial alcanzada experimentalmente y la sensibilidad de nuestro prototipo a diferentes espesores y densidades. Se encontraron buenas resoluciones espaciales y buena sensibilidad a diferentes materiales y espesores como puede observarse en la figura de debajo. Incluso una fina capa de cinta adhesiva (20-30 mm) que puede observarse en la fotografía de la imagen c) fue detectada como puede observarse en la imagen d), obtenida empleando el haz de protones.

Durante los dos próximos años, 2020 y 2021, más experimentos con un prototipo incluyendo un detector de centelleo para medir la energía residual de los protones serán realizados tanto en instalaciones internacionales como nacionales con haces de protones con energías similares a las empleadas en tratamientos con protonterapia: 100-230 MeV.

ENSAR2- PASPAG APLICACIÓN A LA DETECCIÓN SIMULTÁNEA DE RADIACIÓN DE PARTÍCULAS Y GAMMA (O. Tengblad, I. Marroquín, E. Nácher, A. Perea)

Nuevos materiales de centelleo con identificación γ -n que son insensibles a la humedad, están emergiendo campos magnéticos, junto con sensores livianos de baja potencia como SiPM son ideales para usarse en Seguridad Nuclear. La colaboración de PASPAG ha identificado aplicaciones sociales de nuestra I + D, especialmente en el caso de la seguridad nuclear, nuestro objetivo es un dispositivo detector ligero y compacto que pueda ser transportado por un vehículo no tripulado (controlado a distancia) para mediciones en áreas de alta radiación. Debe estar equipado con una computadora precisa de pequeño tamaño con sistemas de ubicación geográfica y marca de tiempo incorporado para la comunicación inalámbrica a una estación base. (Procedimientos de física nuclear y de partículas 00 (2019) 1-3)

El Raspberry Pi es un dispositivo programable barato (con Linux como sistema operativo predeterminado), puede equiparse con periféricos como una cámara, GPS e incorpora conectividad LAN inalámbrica y Bluetooth. Además, el GPIO (Entrada de Salida de Propósito General) le permite conectar el Pi a cualquier número de extensiones físicas. La Raspberry Pi viene con bibliotecas preinstaladas para acceder a IO usando Python, C o C++.

Las señales detectadas se digitalizan mediante un ADC integrado y se conectan al Pi a través de los pines I2C GPIO y se transmiten a través de LAN inalámbrica a la estación base.



S444/TEN -- R3B - COMMISSIONING (O. Tengblad, E. Nácher, A. Perea)

En el año 2019, hemos preparado y montado detectores para la colaboración R3B y sus experimentos para la campaña 2019. El énfasis se ha puesto en la identificación y trayectoria del haz entrante y saliente junto con el calorímetro CALIFA y su rastreador de Si. Además, el imán dipolo de área grande, GLAD, se ha comisionado utilizando haces de momento definido. Todos los equipos experimentales se incorporaron al NUSTAR DAQ y se obtuvieron calibraciones del sistema detector.

El experimento S444 obtuvo el tiempo de haz del 18 al 24 de febrero de 2019, obtuvimos solo un haz parásito de ^{12}C y principalmente durante la noche, por lo que solo se entregó el 10% del tiempo de haz aprobado. El tiempo de haz fue bastante exitoso, observamos un funcionamiento estable de CALIFA con un umbral del orden de 150-200 KeV. Los preamplificadores de doble rango funcionaron como se esperaba. Algun ruido podría ser inducido por los cables muy largos, para ser investigados. Se habían establecido varios objetivos para esta primera campaña; Objetivo 1: Gran haz de luz en GLAD a varias energías para la calibración. Objetivo 2: correlación p2p en Si-tracker con CALIFA obtuvimos un seguimiento con una resolución de 200 μm , que está de acuerdo con las expectativas. Objetivo 3: sección transversal de reacción ^{12}C en H_2 , se obtuvieron datos para varias energías y objetivos. La unión temporal de eventos de diferentes detectores no fue perfecta, para trabajar.

La puesta en marcha continuó durante el tiempo de haz del S473 del 24 al 28 de febrero de 2019, donde solo se entregaron dos días de haz y solo un isótopo ^{120}Sn . Sin embargo, se midieron varios objetivos y energías (200 - 800 AMeV) para ^{120}Sn . En resumen, hemos recopilado un conjunto importante de datos para comprender la configuración y el rendimiento de R3B, el análisis fuera de línea está en curso. Los sistemas se ajustaron aún más para el experimento con haz de ^{16}O (S454) que tuvo lugar en las primeras semanas de abril.

Resumen de la campaña de 2019: la configuración del detector R3B es muy compleja con varios sistemas de detectores totalmente independientes que tienen que funcionar en modo coherente, utilizando marcas de tiempo muy precisas y uniones de datos en línea en eventos coincidentes. Estos primeros tiempos de emisión en febrero y abril han sido muy importantes para depurar y juntar muchas piezas. El sistema funcionó sorprendentemente bien desde el principio y hemos

podido obtener datos valiosos, que ayudarán a mejorar aún más el sistema mientras nos preparamos para los experimentos en 2020.

IS633: CAPTURA ELECTRÓNICA DEL ^8B A LOS ESTADOS EXCITADOS DE ALTA ENERGÍA DEL ^8Be . CARACTERIZACIÓN DE LA FUNCIÓN RESPUESTA DE LOS DETECTORES USADOS EN EL EXPERIMENTO IS633 (Doctorando S. Viñals i Onsès, O. Tengblad, M.J.G. Borge, E. Nácher, A. Perea)

El experimento IS633 tiene como objetivo estudiar el doblete 2_+ a 16.6 y 16.9 MeV del núcleo ^8Be poblados mediante la desintegración β^+ y la captura electrónica (EC) del ^8B respectivamente. Además, es de interés la emisión retardada del protón del estado de energía de 17.6 MeV, que no ha sido observado con anterioridad y daría evidencias de la estructura de halo del núcleo ^8B .

En este trabajo se caracteriza el montaje experimental usado en el experimento, obteniendo la función respuesta de los detectores. La función respuesta se ha calculado usando la herramienta de simulación Geant4. Para ello, se ha empezado definiendo cada uno de los 4 Double-sided Strip Silicon Detector (DSSD) siguiendo las especificaciones facilitadas por la empresa y, posteriormente, se han ajustado los diferentes componentes individualmente para cada detector hasta reproducir la respuesta a la fuente de calibración usada, que incluye los núcleos ^{148}Gd , ^{239}Pu , ^{241}Am y ^{244}Cm . El ajuste se ha centrado en la desintegración monocromática del ^{148}Gd y una vez reproducido su espectro se ha comprobado con los otros tres núcleos presentes en la fuente. En la Fig. 1 se muestra el acuerdo entre el espectro experimental de calibración (azul) y el espectro simulado teniendo en cuenta la función respuesta (rojo) para uno de los detectores caracterizados.

Este estudio permite seguir con el análisis del experimento usando la teoría de R-matrix, para el cual es necesario saber la función respuesta de los detectores. En estudios anteriores se usaba una función matemática como función respuesta. Este trabajo es el primero en el que se reproducen los fenómenos experimentales de un DSSD incluyendo únicamente parámetros físicos.

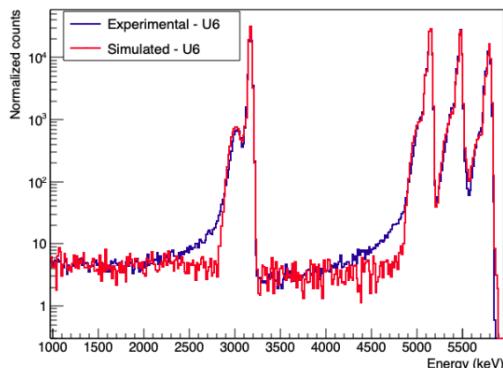


Figura 1: Comparación entre el espectro experimental de calibración (azul) y el espectro simulado al aplicar la función respuesta definida (rojo) para una fuente estándar de 4 α .

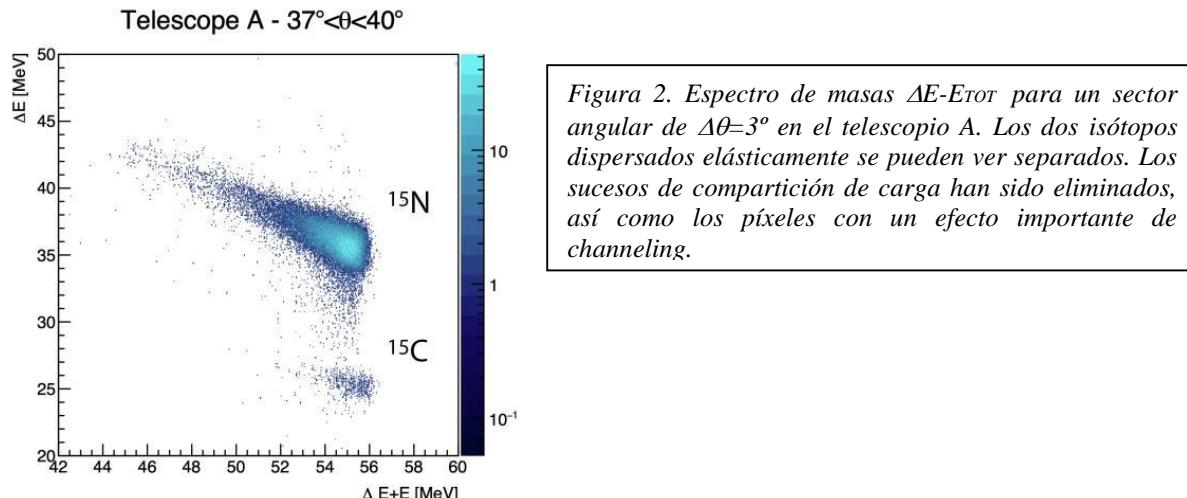
DISPERSIÓN DE ^{15}C A ENERGÍAS EN TORNO A LA BARRERA DE COULOMB CON BLANCOS PESADOS EN HIE-ISOLDE, CERN. (Doctorando J. D. Ovejas, I. Martel, O. Tengblad, M. J. G. Borge et al.)

El isótopo de carbono ^{15}C es débilmente ligado ($S_n=1218 \text{ keV}$), característica que ha sido estudiada en varios experimentos a alta energía. La distribución de momentos de los fragmentos tras la ruptura de un neutrón presenta una componente estrecha de $67(3) \text{ MeV/c}$. Además, su sección eficaz de interacción es ligeramente mayor que la de sus vecinos $^{14,16}\text{C}$, sugiriendo esto una posible estructura de halo. Dada su particular configuración en su estado fundamental, el núcleo de ^{15}C sería un sistema nuclear único con un halo de un neutrón en onda $s_{1/2}$.

Con el objetivo de estudiar esta estructura de halo tan debatida, se llevó a cabo el primer estudio dinámico de ^{15}C a energías en torno a la barrera de Coulomb en agosto de 2017 en HIE-ISOLDE (CERN). Para observar los efectos de su estructura en la dispersión elástica, se produjo, purificó y aceleró un haz de ^{15}C (con ^{15}N presente como contaminante) hasta los 4.37 MeV/u y se hizo impactar contra un blanco de ^{208}Pb . Las partículas cargadas dispersadas se midieron con el detector GLORIA, consistente en seis telescopios de silicio de alta granularidad que rodeaban el blanco de reacción.

Estos detectores, de un grosor de 40 um (parte delantera del telescopio) y de 1 mm (parte trasera), presentan una cobertura desde 15° hasta 165° con una resolución angular de $2\text{-}3^\circ$ y una eficiencia geométrica del 25%.

Se han realizado simulaciones de Monte Carlo para reproducir las pérdidas de energía en el sistema de detección, se han estudiado los sucesos de compartición de carga entre las bandas de los detectores, se ha analizado el efecto del *channeling* del contaminante del haz y se ha optimizado el punto de reacción desde el que se calculan los ángulos y ángulos sólidos subtendidos por los píxeles de los detectores.



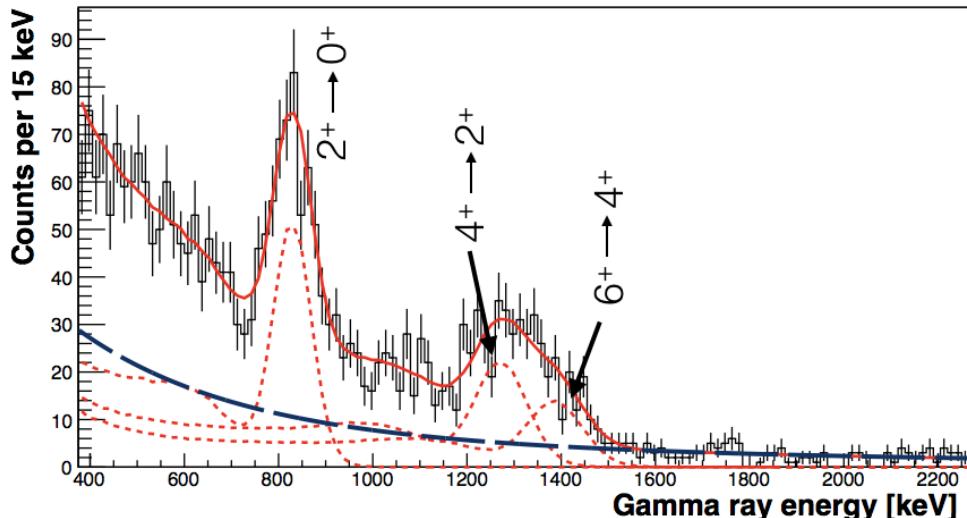
EXPERIMENTO NP1012-RIBF61: THE PYGMY RESONANCE IN TIN ISOTOPES STUDIED BY INELASTIC ALPHA SCATTERING (FPA2017-84756-C4-2-P, PostDoc Victor Vaquero y Andrea Jungclaus)

Una de las herramientas principales para entender la estructura nuclear es el modelo de capas. En este modelo, los nucleones ocupan orbitales mono-particulares bajo la influencia de un potencial promedio creado por las interacciones entre todos los nucleones. En este concepto, las probabilidades de ocupación de los estados mono-particulares (de una partícula o un hueco) en los vecinos impares de los núcleos doblemente mágicos deberían ser unidad. Sin embargo, el acoplamiento a excitaciones colectivas del core puede llevar a una fragmentación de la fuerza mono-particular. En este experimento, que ha sido realizado en la Radioactive Isotope Beam Factory (RIBF), operado por el RIKEN Nishina Center y el Center for Nuclear Study de la Universidad de Tokyo, se han determinado los factores espectroscópicos de los estados mono-particulares en ^{131}Sn y ^{131}In . Además, se ha observado por primera vez la desexcitación del estado de protón $0f_{5/2}$ en ^{131}In . Los estados excitados de interés han sido poblados en reacciones de substracción de un neutrón o de un protón de un haz radiactivo de ^{132}Sn a energías relativistas. Los resultados experimentales se han comparado con cálculos teóricos basados en el modelo de acoplamiento partícula-vibración relativista y con la información experimental disponible sobre estados mono-particulares alrededor del núcleo doblemente mágico ^{208}Pb . Este trabajo ha sido publicado recientemente en *Physical Review Letters* (V. Vaquero, A. Jungclaus et al., *PRL* 124, 022501 (2020)).

EXPERIMENT NP1712-RIBF145R1: FIRST SPECTROSCOPY OF EXCITED STATES IN THE $T_z = 2$ NUCLEI $^{56}\text{Zn}_{26}$ AND $^{60}\text{Ge}_{28}$ – ISOSPIN SYMMETRY TOWARDS THE PROTON DRIP-LINE (FPA2017-84756-C4-2-P, PhD student Álvaro Fernández, Andrea Jungclaus)

La invariancia de la interacción nuclear frente al intercambio del número de protones y neutrones -simetría de isospín-, se ha considerado una simetría fundamental de la naturaleza desde los trabajos fundamentales de Heisenberg y Wigner. Del estudio de los Isobaric Analogue States (IAS) en núcleos espejo, se observó que la presencia de la interacción electromagnética no es suficiente por sí sola para explicar las diferencias observadas experimentalmente entre las energías de excitación de los IAS. A este respecto cabe destacar los resultados experimentales obtenidos en las últimas décadas en relación con interacciones de origen nuclear que rompen la simetría de isospín. La información recogida sobre Mirror Energy Differences (MED) en núcleos cuyos nucleones de valencia ocupan la capa $0f_{7/2}$ –núcleos entre los doblemente mágicos ^{40}Ca y ^{56}Ni - plantean la cuestión sobre el origen fundamental de dichos efectos y su persistencia hacia regiones de núcleos más pesados.

El objetivo del experimento NP1612-RIB145 es extender la información sobre MED hacia la línea de goteo de protones estudiando el par de núcleos espejo con $T_z=-2$ $^{56}\text{Zn}/^{56}\text{Fe}$. El experimento se llevó a cabo en la Radioactive Isotope Beam Factory (RIBF), operada por el RIKEN Nishina Center y el Center for Nuclear Study de la Universidad de Tokyo (Japón), en abril de 2019. En este experimento, se produjo un haz radioativo de ^{57}Zn que fue seguidamente separado e identificado en el espectrómetro BigRIPS. Se poblaron estados excitados en el ^{56}Zn mediante una reacción de substracción de 1 neutrón, y la radiación gamma desexcitando dichos estados se midió en el espectrómetro gamma DALI2+, compuesto por 226 detectores de NaI. El análisis de los datos está en curso y se han obtenido valores preliminares para las MED en los estados excitados de la secuencia yrast hasta el 6^+ .



Espectro gamma del ^{56}Zn observado tras la reacción de substracción de un neutrón sobre el ^{57}Zn . La línea continua representa el ajuste a formas de línea simuladas. Las componentes individuales del ajuste se representan con líneas discontinuas.

COMPORTAMIENTO FÍSICO A NANO-ESCALAS

Probablemente el hidrógeno molecular (H_2) es el candidato actual más claro para sustituir a los combustibles fósiles como vector energético medioambientalmente neutro. El almacenamiento seguro y eficiente de H_2 presenta, sin embargo, una serie de desafíos tecnológicos aún no resueltos. Una de las posibles soluciones es la adsorción del H_2 a bajas temperaturas en materiales nano-estructurados suficientemente ligeros. Sin embargo, las limitaciones prácticas imponen una temperatura mínima de 77 K (la del aire líquido) y unas 50 atmósferas de presión máxima. Esto impone unas condiciones termodinámicas particularmente problemáticas ya que por encima de los 33 K el Hidrógeno molecular es supercrítico, esto es, es imposible condensarlo cualquiera que sea la presión. Sólo mediante un confinamiento extremo, comparable al tamaño molecular, se puede superar esta restricción termodinámica.

Durante 2019 hemos completado un estudio experimental sobre la preparación de materiales nanoestrucurados mediante la intercalación de 1-Propanol en óxido de grafito. En particular, hemos observado diferencias de comportamiento sorprendentemente altas en función de la composición isotópica del 1-Propanol que influyen en la estructura final del material.

Por otro lado, se ha realizado un estudio numérico atomístico detallado de la formación y estabilidad de nano-partículas de Ni-Au en concomitancia con los correspondientes estudios experimentales de preparación y caracterización.

FENOMENOLOGIA VITREA EN CRISTALES CON MINIMO GRADO DE DESORDEN

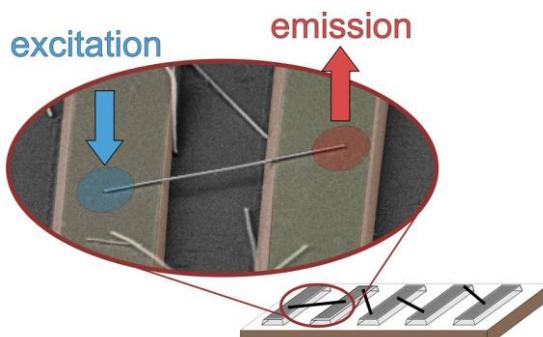
En esta línea se colabora con el grupo del Prof. Josep Tamarit de la Universidad Politécnica de Barcelona. El esfuerzo desde hace algún tiempo se ha centrado en el estudio de sistemas cristalinos los cuales, debido a la presencia de algún tipo de desorden, presentan, al menos en parte, la misma fenomenología que exhiben los medios desordenados en sus propiedades térmicas, mecánicas o dieléctricas a baja temperatura. Tal desorden puede ser de naturaleza estática, generado p. ej. por diferencias en la estadística de distribución de algún sustituyente, o de naturaleza puramente dinámica. El objeto de esta línea de investigación radica en que estos materiales, al presentar un tipo de desorden cuantificable, permiten identificar de forma inequívoca las entidades microscópicas capaces de acoplarse al campo acústico y generar los fenómenos que dan lugar a las anomalías antes mencionadas (sistemas de dos niveles, modos “blandos” etc.). Durante 2019 hemos podido identificar como dichas anomalías, en el caso de los cristales de la forma CBrnCl_4 ($n = 1,2$), se deben a desorden sustitucional (intercambio de especie atómica manteniendo las posiciones) entre átomos Cl y Br.

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. Hemos demostrado que configuraciones simples de metasuperficies pueden admitir BICs robustos y protegidos por simetría. Sobre la base de una teoría generalizada de dipolos eléctricos/magnéticos acoplados para redes 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 (ED) y/o magnéticos (MD). Se ha demostrado que una red plana periódica de dímeros dipolares produce un BIC a incidencia normal a medida que dichos dipolos se hacen idénticos; esto se ha verificado experimentalmente a través de metasuperficies de dímeros de varillas planas de oro en el dominio de THz por nuestros colegas en el grupo *Surface Photonics* de la *Technical University of Eindhoven*. Se ha predicho teóricamente una fenomenología muy similar para una metasuperficie de cilindros/discos de Si con resonancias MD/ED superpuestas. Asimismo, hemos demostrado que un conjunto de MD perpendiculares exhibe un BIC llamado de Brewster a incidencia normal, que evoluciona a medida que se rotan los MDs (no degenerados) hacia un cuasi-BIC a incidencia oblicua con una fenomenología peculiar. En este sentido, demostramos que una metasuperficie de discos de alto índice de refracción en el dominio de GHz proporciona evidencia experimental clara de tales cuasi-BICs de Brewster, según lo verificado por nuestro colaborador Jean-Michel Geffrin en el Institut Fresnel en Marsella. Nuestro trabajo teórico se ha desarrollado en colaboración con el *Donostia International Physics Center*, apoyado por el proyecto LENSBEAM de Excelencia MICIU.

FOTOLUMINISCENCIA DE NANOHILOS SEMICONDUCTORES

El estudio de cavidades ópticas acopladas con emisores cuánticos ha desarrollado un campo de la Nanofotónica de enorme interés, por ejemplo, para la generación altamente eficiente de fotones individuales o el control de no linealidades muy intensas. Sin embargo, cuando tiene lugar en el régimen de tamaños de cavidad nanométricos, muy por debajo de la longitud de onda de la luz emitida, la interacción se complica por las pérdidas no. En nuestro reciente trabajo, hemos conseguido una disminución muy eficiente de la recombinación no radiativa (no deseada) para cavidades muy pequeñas tipo guías de onda utilizando nanohilos semiconductores de estructura núcleo-coraza. En experimentos realizados por nuestros colaboradores de la Universidad de Regensburg sobre fotoluminiscencia de nanohilos semiconductores, se muestran las ventajas de tales nanohilos, a modo de cavidad-guía de onda unidimensional, que alojan excitones libres que emiten luz al decaer. En dicho experimento, el control del diámetro de los nanohilos permite aumentar la vida media de esos excitones en 2 órdenes de magnitud (hasta 80 ns). Además, hay que destacar que, para los diámetros más pequeños, se muestra que esta vida media se puede manipular a su vez modificando el entorno dieléctrico de los nanohilos (el substrato en concreto). Este control espacial totalmente dieléctrico de la emisión espontánea de luz a lo largo de los nanohilos se explica mediante el modelo teórico y los cálculos numéricos desarrollados en nuestro grupo CSIC, basados en la descripción de la emisión espontánea como acoplamiento a los modos ópticos de los nanohilos. Esta observación abre perspectivas fascinantes a nivel fundamental para controlar la interacción luz-materia a escala nanométrica, con posibles aplicaciones futuras, especialmente para dispositivos nanofotónicos sintonizables y activos: como p. ej. LEDs, células solares, nanoláseres, qubits, nanosensores, etc.



TÉCNICAS ESPECTROSCÓPICAS APLICADAS AL ESTUDIO DE MATERIALES DE INTERÉS EN EL PATRIMONIO CULTURAL

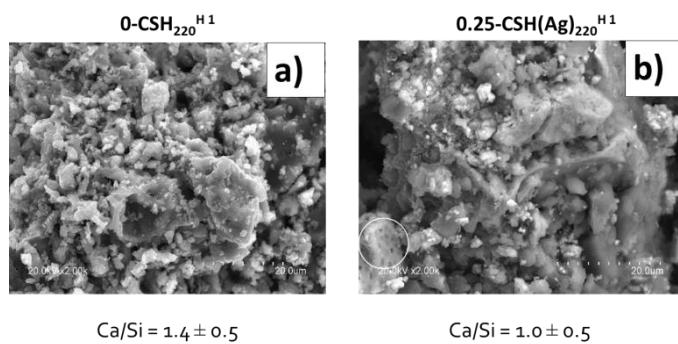
Dentro de esta línea de investigación, se ha continuado la colaboración con el Departamento de Investigación Científica del Museo Metropolitano de Arte de Nueva York para el estudio de colorantes naturales. En esta ocasión se ha estudiado el colorante rojo alkanina, cuya estructura es derivada de la naftazarina. Se han llevado a cabo los análisis por espectroscopía Raman y SERS. En este último caso, se han empleado distintos valores de pH con el fin de determinar las condiciones óptimas para la detección SERS de este colorante. Por otra parte, se ha llevado a cabo el estudio vitracional de la molécula de alkanina con el objetivo de asignar los modos normales de vibración a las bandas observadas en los espectros Raman y SERS. En primer lugar, se ha llevado a cabo la optimización de la geometría de la molécula de colorante, para posteriormente calcular el espectro Raman. Para ello se han empleado cálculos computacionales DFT con

un nivel de teoría B3LYP y el sistema de bases 6-31+G**. Con estos datos se ha podido deducir la forma en que la molécula de alkanina interacciona con las nanopartículas de plata.

En colaboración con el Profesor Lombardi del *City College of New York* se ha realizado el análisis vibracional de sustancias de abuso (THC, canabinol, canabidiol y HU-210b) cuya caracterización por espectroscopía Raman y SERS había sido llevada a cabo en el departamento de Química del *City College*. Con ayuda de los cálculos DFT se ha asignado las bandas Raman y SERS a los modos normales de vibración. Por comparación de la intensidad y posición de las bandas de los espectros experimentales se ha podido deducir el mecanismo de adsorción de estas drogas sobre las nanopartículas de plata empleadas como soportes SERS.

TÉCNICAS ESPECTROSCÓPICAS APLICADAS AL ESTUDIO DE LOS MATERIALES ARTIFICIALES DEL PATRIMONIO

Durante el año 2019 hemos seguido trabajando sobre la posibilidad de sintetizar AgNPs suportadas en silicato cálcico hidratado. Estos compuestos serían biocompatibles y por lo tanto se estudiará su posible utilización como agentes transportadores de fármacos. Las variables a estudiar son la concentración de Ag, la temperatura y la presencia de aluminio en el silicato cálcico hidratado. Actualmente se ha logrado sintetizar silicato cálcico hidratado con partículas de Ag. Dichos compuestos se han caracterizado mediante diferentes técnicas instrumentales (SEM/EDX, DRX, FTIR, Micro-Raman) y se trabaja sobre la posibilidad de utilizarlos como sensores.

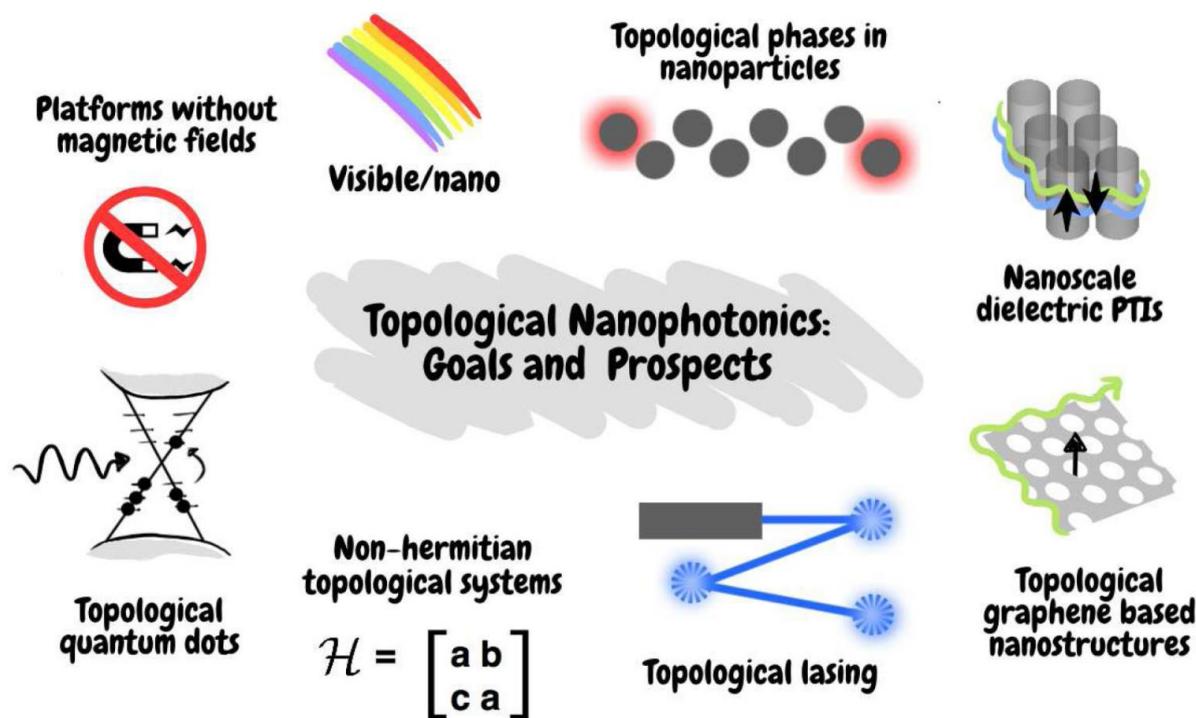


En colaboración con el Instituto de Ciencias de la Construcción Eduardo Torroja (IETcc-CSIC) se trabaja en la síntesis de cementos con aplicación en impresoras 3D. En la síntesis de los cementos se utilizarán materiales reciclados procedentes de la demolición.

En colaboración con el Servicio de Criminalística del Instituto Nacional de Toxicología y Ciencias Forenses de Madrid, desde el año 2018 se está desarrollando una metodología de análisis de huesos basado en la aplicación de técnicas espectroscópicas, Micro-Raman y Micro-FTIR.

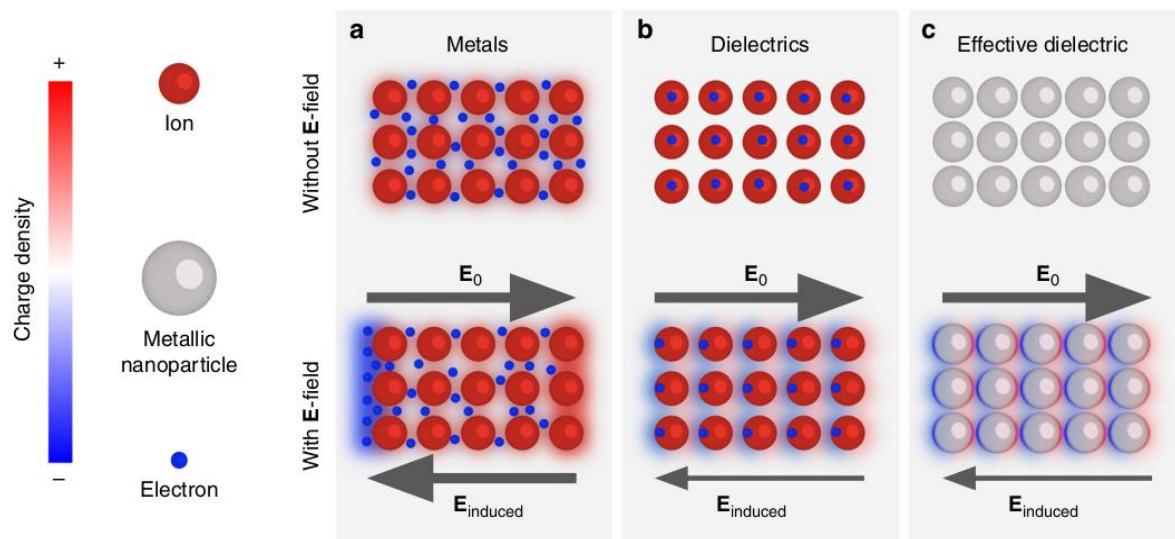
NANOFOTÓNICA TOPOLOGICA

Los sistemas fotónicos topológicos, con su capacidad de albergar estados protegidos contra el desorden y las perturbaciones, nos permiten hacer con los fotones lo que hacen los aislantes topológicos con los electrones. La fotónica topológica puede referirse a sistemas electrónicos que interactúan luz o a sistemas puramente fotónicos. Al reducir estos sistemas a la nanoescala, mostramos cómo se puede aprovechar una mayor sensibilidad en la detección de moléculas y combinar esto con la protección de los estados fotónicos topológicos, lo que nos permite diseñar la densidad local de estados fotónicos y avanzar hacia uno de los objetivos finales de la ciencia moderna: el control preciso de los fotones en la escala de los nanómetros. Esto es de suma importancia tanto para aplicaciones nanotecnológicas como para investigación fundamental en materias condensada. Para sistemas puramente fotónicos, trabajamos con estados bosónicos en lugar de fermiónicos, por lo que la implementación de la topología en estos sistemas requiere nuevos paradigmas. Tratar de enfrentar estos desafíos significa ayudar en la creación del nuevo y emocionante campo de las nanofotónicas topológicas, con aplicaciones de gran alcance.



METAMATERIALES METÁLICOS EXTREMADAMENTE TRANSPARENTES

El diseño de componentes ópticos acromáticos requiere materiales con alta transparencia y baja dispersión. Hemos demostrado que, aunque los metales son muy opacos, redes periódicas y densas de nanopartículas metálicas pueden ser más transparentes a la radiación infrarroja los dieléctricos como el germanio, incluso cuando las redes tienen más del 75% de metal en volumen. Estos metamateriales forman dieléctricos efectivos que están prácticamente libres de dispersión cromáticas en rangos de longitudes de onda que va desde las micras hasta los milímetros o más. Además, los índices de refracción pueden ajustarse alterando el tamaño, la forma y el espaciado de las nanopartículas, lo que permite el diseño de lentes con índice de refracción que varían en el espacio y que guían y enfocan la luz en la microescala. El campo eléctrico también está fuertemente concentrado en los espacios entre las nanopartículas metálicas. El enfoque y la compresión simultánea del campo eléctrico produce puntos calientes fuertes "dblemente mejorados" que podrían aumentar las mediciones realizadas utilizando espectroscopía infrarroja y otros procesos ópticos no lineales. Esto nos permite el diseño de dispositivos ópticos para guiar o amplificar la luz en un rango extremadamente amplio de frecuencias, esencialmente sin un límite superior en la longitud de onda.



NANOFABRICACIÓN

La fabricación de nanoestructuras con propiedades ópticas avanzadas es uno de los objetivos más importantes de nuestro grupo. La interacción de nanopartículas plasmónicas de determinados metales plasmónicos mediante el uso de una radiación de una apropiada longitud de onda genera una alta intensificación de campo eléctrico, lo que puede ser utilizado para detección molecular por Raman o Fluorescencia. Es por ello que durante este periodo se han desarrollado métodos de nanopartículas (NPs) metálicas con propiedades plasmónicas interesantes para aplicaciones espectroscópicas y también catalíticas. El principal objetivo de esta nanofabricación ha sido la obtención de sistemas nanoscópicos dotados de una morfología tal que permiten una alta intensificación del campo electromagnético. La estrategia seguida para la obtención de estos sistemas ha sido: a) La preparación de NPs anisotrópicas con morfologías especiales que dan lugar a de gran intensificación de campo, como nanoestrellas; y b) la asociación de nanopartículas esféricas mediante el uso de moléculas bifuncionales, dando lugar a la formación de cavidades interpartícula o *nanogaps* altamente eficaces en la intensificación de la dispersión Raman (hot spots). Se ha prestado una mayor atención a la fabricación de nanoestrellas de plata, ya que presentan un mayor número de ventajas respecto a las de oro, como la mayor eficacia SERS (mayores factores de intensificación) y el mayor intervalo de actividad, ya que las NPs de Ag presentan resonancias de plasmón en todo el espectro visible y en la zona del infrarrojo cercano. Los protocolos de nanofabricación empleados por nosotros evitan el empleo de sustancias surfactantes, como las normalmente usadas en la preparación de nanoestrellas de Au, ya que estas sustancias evitan el acercamiento del analito a estudiar a la superficie disminuyendo así la eficacia de estos sistemas en espectroscopía. A lo largo del año 2019 se han mejorado los métodos de fabricación de nanopartículas, profundizando en la caracterización de las mismas. Asimismo, se ha comenzado a utilizar otros metales, como el aluminio, para obtener superficies nanoestructuradas activas en la región del UV.

En colaboración con investigadores del Instituto de Óptica, se está llevando a cabo la obtención de superficies nanoestructuradas de Ag y Au obtenidas sobre superficies modificadas mediante procesado láser. Entre los métodos empleados destacan: a) deposición por láser pulsado (PLD) que da lugar a superficies de altas prestaciones en plasmónica con nanogaps entre partículas, y b) LIPSS (Laser Induced Periodic Surface Structures), que también generan superficies dotadas de nanestructura controlable.

FUNCIONALIZACIÓN DE SUPERFICIES: FABRICACIÓN DE NANOSENSORES

La funcionalización de las superficies metálicas obtenidas mediante autoensamblaje de moléculas orgánicas es también una línea importante de investigación y se le ha seguido prestando especial atención durante 2019. La funcionalización permite aumentar de manera considerable la sensibilidad y la selectividad de las nanoestructuras fabricadas, dando lugar a superficies de altas prestaciones, al combinar las propiedades físicas de los sistemas metálicos obtenidos e inmovilizados, con las propiedades químicas de las moléculas orgánicas autoensambladas sobre ellos. Además, estas moléculas pueden permitir que las NPs sean biocompatibles, lo que presenta gran interés en aplicaciones médicas, y permiten controlar el acoplamiento de estos sistemas. Se están empleando ensambladores con cavidades internas o cavitands, como ciclodextrinas funcionalizadas con grupos tioles, que aumentan la adsorción de estos compuestos sobre la superficie. También se están ensayando otro tipo de cavitands de gran interés: los calixarenos. Estos compuestos se fabrican mediante métodos diversos, dando lugar a diferentes estructuras que se están ensayando sobre superficies nanoestructuradas. La síntesis de estos calixareños se está produciendo en la Universidad de Chile, que en los últimos tiempos nos ha proporcionado materiales de gran interés para ser aplicados en el diseño de sensores ópticos basados en SERS.

DETECCIÓN DE CONTAMINANTES

Las superficies obtenidas mediante nanofabricación se han aplicado en la detección de sustancias contaminantes, fundamentalmente pesticidas de difícil degradación. Primeramente, se están desarrollando protocolos de detección para sustancias que no necesitan funcionalización de las superficies, debido a que pueden interaccionar directamente con la superficie. La funcionalización mediante ciclodextrinas y calixareños se ha aplicado en el ensamblaje y detección de POPs (persistent organic pollutants) que no poseen grupos químicos activos capaces de interaccionar con el metal.

Durante el año 2019 se han aplicado estas superficies en la detección de bisfenoles, sustancias altamente contaminantes empleadas en la fabricación de plásticos. Este trabajo se ha realizado en colaboración con investigadores de la Universidad de Florencia (Italia).

En colaboración con la Universidad UNESP de Sao Paulo (Brasil) e investigadores de la Universidad de Bolonia (Italia), se ha desarrollado una plataforma sensora capaz de detectar la degradación de algunos pesticidas triazínicos, y evidenciar la presencia de los productos de degradación de estos contaminantes en agua.

APLICACIÓN DE ESPECTROSCOPIA VIBRACIONAL CONVENCIONAL Y DE SUPERFICIE AL ANÁLISIS DE BIOMOLÉCULAS

Se ha avanzado en el estudio de la adsorción de péptidos terapéuticos con nanopartículas plasmónicas y otros péptidos de interés como fertilina. Esta línea de trabajo proyecta la funcionalización de NPs con biomoléculas con el fin de aumentar su biocompatibilidad y su especificidad biomolecular, así como la sensibilidad en la detección y biodiagnóstico. Se han estudiado moléculas modelo de estos péptidos que contienen las tríadas de aminoácidos capaces de interaccionar con la superficie con el fin de modelar el mecanismo de interacción de estas biomoléculas.

Se ha puesto a punto un método de detección de contaminantes basado en la acción catalítica de la enzima acetilcolinesterasa (ACE). Este biocatalizador es capaz de romper la acetiltiocolina (ATC) generando tiocolina, una molécula que es capaz de adsorberse fuertemente sobre nanopartículas plasmónicas (Au y Ag) siendo fácilmente detectable. La detección se basa en el hecho de que los contaminantes actúan como inhibidores de la actividad catalítica de ACE. En relación con esta línea de investigación, se ha descubierto que las nanopartículas de plata actúan también degradando abióticamente la ATC.

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

Se ha avanzado en la línea de investigación dedicada al estudio del patrimonio. Concretamente en lo que respecta al análisis de colorantes orgánicos de difícil análisis mediante Raman convencional. Dentro de esta línea de trabajo, se ha perfeccionado la fabricación de nanopartículas de plata por irradiación láser sobre fibras de lana con el fin de realizar un análisis in-situ de colorantes. Esta investigación se está realizando en colaboración con la Universidad de Bolonia. El empleo de este tipo de substratos metálicos es muy interesante para el análisis in situ de pigmentos y tintes de interés artístico, puesto que se pueden preparar directamente en un punto específico del material (fibras, en este caso), además de no dejar ninguna marca evidente en el mismo. Durante el año 2019 se ha aplicado este método a la caracterización de colorantes rojos monoazoicos y colorantes negros poliazoicos.

Las técnicas de fotorreducción in-situ y la simple deposición de nanopartículas con forma de estrella sobre fibras históricas del patrimonio histórico chileno han permitido detectar la presencia de biomoléculas procedentes del insecto empleado para la extracción del colorante en aquellas muestras que contenían cochinilla. Este hallazgo permite obtener importante información arqueológica acerca de las prácticas empleadas en los procesos de tinción.

La técnica SERS permite llevar a cabo estudios forenses de materiales arqueológicos y patrimoniales. En este sentido, y en colaboración con investigadores de la Universidad UCLA de Los Ángeles se ha puesto a punto un método para aplicación de SERS en el análisis de drogas y estupefacientes encontrados en materiales biológicos de origen arqueológico, como el cabello de personas que consumieron estas sustancias en el pasado.

Durante el año 2019 se ha iniciado una nueva línea de trabajo llamada Filología Forense en colaboración con investigadores de la Universidad Cà Foscari de Venezia. Se pretende aplicar técnicas espectroscópicas (Raman, IR y XRF) en el estudio de tintas ferrogálicas con el fin de obtener información procedente de manuscritos antiguos en relación con el origen de la tinta y su localización geográfica y temporal.

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.
- Cristalización en microchorros criogénicos de líquidos moleculares.
- Parámetros espectroscópicos de moléculas relevantes en procesos colisionales, atmosféricos o de combustión.
- Modelización atomística y caracterización experimental de fases minerales, arcillas, silicatos, oxalatos y fases secundarias del combustible nuclear gastado.
- 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 en gases a baja presión.
- Espectrometría de masas de iones y neutros con resolución de energía.
- Espectroscopía de emisión de plasmas en las regiones visible y milimétrica.
- 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.
- Microchorros de líquidos subenfriados.
- Criogenia.
- Espectroscopía de Doble resonancia Raman-Raman.
- Espectroscopía Infrarroja por Diferencia de Frecuencias.

LABOR INVESTIGADORA:

FÍSICA MOLECULAR DE SISTEMAS ASTROFÍSICOS Y PLASMAS

Hielos astrofísicos

En esta línea de investigación generamos hielos similares a los que se encuentran en distintos entornos astrofísicos, como las superficies de granos de polvo del medio interestelar, las superficies frías de objetos lejanos de nuestro sistema solar, o en los núcleos de cometas. Durante el año 2019 hemos estudiado la interacción de N₂, CO, CH₄ y CO₂ con superficies de carbono amorfo hidrogenado (HAC) análogas a los granos del polvo del medio interestelar, generadas en el laboratorio de Plasmas del IEM. Para ello hemos utilizado la nueva cámara de ultra alto vacío, depositando pequeñas dosis de volátiles sobre las superficies de HAC a temperaturas bajas (entre 20 y 30 K) y obteniendo recubrimientos inferiores a una monocapa. Estos recubrimientos se desorben de forma controlada, aprovechando la configuración “line of sight” del cuadrupolo de masas, que permite recoger las moléculas desorvidas provenientes exclusivamente de la superficie carbonácea. Se obtuvieron de este modo las distribuciones de energía de desorción de N₂, CO, CH₄ y CO₂ sobre HAC. Una conclusión destacada es que se observa una interacción más fuerte de los volátiles sobre las regiones aromáticas que sobre las cadenas alifáticas presentes en estas superficies. En esta misma línea de investigación y desde el punto de vista teórico este año se ha publicado el trabajo realizado durante la estancia del doctorando Germán Molpeceres en el grupo

de Dr. Albert Rimola en la Universidad Autónoma de Barcelona, sobre la formación de moléculas de agua en una superficie de silicato.

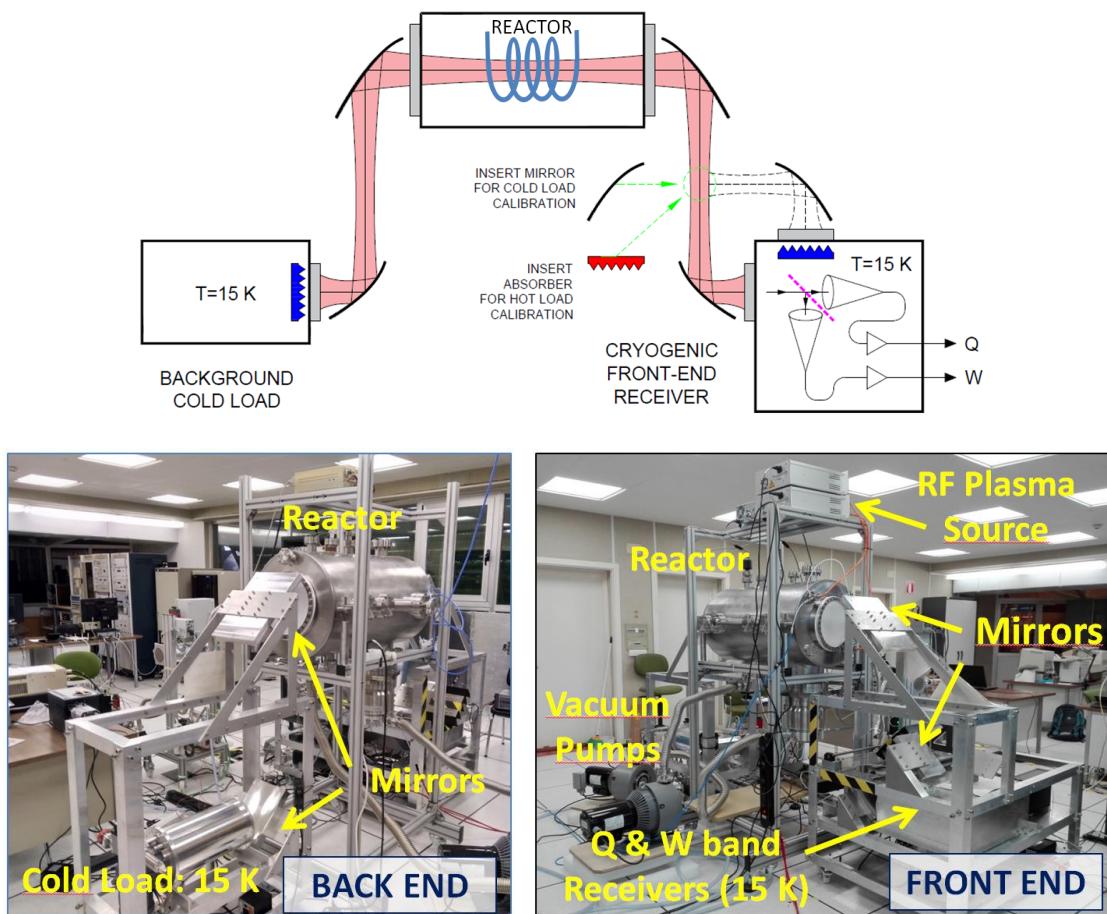
Por otro lado, se ha iniciado una colaboración con los investigadores Izaskun Jiménez-Serra y Guillermo Muñoz-Caro del Centro de Astrobiología, INTA-CSIC, para el estudio de 2-aminooxazole en entornos astrofísicos. Se ha predicho que esta especie interviene en el proceso de formación de RNA, y su detección en el medio interestelar aportaría importantes pistas sobre la química prebiótica. El objetivo de la investigación es obtener espectros infrarrojos a baja temperatura de 2-aminooxazole, así como secciones eficaces de destrucción tanto por radiación UV como por rayos cósmicos.

(He hecho algunas pequeñas modificaciones)

Dentro de la colaboración habitual con el Dr. Pedro Gómez de la U. Complutense a través de la vigente Unidad Asociada en la que estamos incluidos, hemos finalizado una investigación encaminada a predecir espectros en la zona de IR próximo de sólidos amorfos, como los hielos de mezclas de hidrocarburos con agua. El objetivo era comparar los espectros simulados con los que se obtienen en misiones astronómicas principalmente en el sistema solar, y, en particular, con los espectaculares espectros registrados por la sonda New Horizons de la NASA sobre Plutón y Caronte. Esta línea de trabajo se complementó con una nueva colaboración con el Prof. Emilio Artacho, del Cavendish Laboratory de Cambridge (Reino Unido). Los resultados han sido publicados en PCCP (véase apartado de publicaciones).

Caracterización espectroscópica de plasmas fríos de interés astrofísico

Dentro del proyecto europeo Nanocosmos, se ha concluido la instalación y puesta en marcha de un laboratorio de Astrofísica Molecular en el Observatorio Astronómico de Yebes (Guadalajara) para estudiar la emisión rotacional de moléculas de interés astrofísico mediante espectroscopía milimétrica. El nuevo laboratorio dispone de detectores en las bandas Q (31.5-50 GHz) y W (72-116 GHz) del espectro radiactivo y 16 espectrómetros rápidos por transformada de Fourier, proporcionando una resolución de 38 kHz; así como de un reactor químico donde los gases introducidos a bajas presiones pueden ser ionizados y dissociados por electrones en descargas de radiofrecuencia acopladas inductivamente, dando lugar a nuevas especies, o bien ser estudiados en estado neutro. También dispone de criostatos a 15 K para reducir lo más posible la radiación de fondo y para la refrigeración de los receptores. Dicho laboratorio ya se encuentra plenamente operativo y proporcionando excelentes resultados, algunos publicados en 2019 y otros en vías de publicación.



Dinámica de reacciones

Hemos proseguido nuestra larga colaboración sobre dinámica de reacciones con F. J. Aoiz y J. E. Verdasco de la UCM (Unidad asociada CSIC) y con V. Saéz-Rábanos (UPM). En concreto, hemos continuado el estudio de dos sistemas prototípicos, O(³P)+H₂ y F+HD, a temperaturas muy bajas. In la reacción O(³P)+H₂ hemos encontrado efectos dinámicos inesperados que cambian la tendencia del doblete lambda en la zona dominada por efecto túnel en colisiones sin rotación molecular. Los cálculos muestran también un cambio significativo en el mecanismo de reacción al avanzar desde la zona dominada totalmente por efecto túnel hasta la de energías hipertérmicas de colisión. En la reacción F+HD (v=0,1), nuestros cálculos con moléculas sin rotación demuestran la presencia de resonancias de forma de tipo “orbiting” asociadas con valores específicos del momento angular total para energías de colisión inferiores a 2 meV. La estructura de las resonancias es común a los dos canales isotópicos de salida y los picos resonantes son mucho más intensos para la reacción con HD(v=1). Estas resonancias son, en principio, observables pero su detección constituye un gran reto experimental.

Espectroscopía infrarroja de iones moleculares de interés astrofísico

Se ha continuado el estudio de iones moleculares de interés astrofísico. En colaboración con la Universidad de Colonia (S. Schlemmer, O. Asvany and S. Thorwirth), se han medido por primera vez en el laboratorio transiciones de vibración rotación de C¹⁴N⁺ y C¹⁵N⁺. Para ello se ha empleado la técnica de “Laser Induced Inhibition of Complex Growth”, usando como fuente de excitación un láser de cascada cuántica. Los iones se confinan en una trampa de radiofrecuencia a temperaturas de ~7 K por lo que sólo se han medido las transiciones que se originan en los niveles rotacionales más bajos. Actualmente trabajamos en la extensión del trabajo hacia transiciones que implican niveles rotacionales más elevados, empleando una descarga eléctrica en cátodo hueco a temperatura ambiente.

Generación, procesado y estudio de películas y partículas de Carbono Amorfo Hidrogenado

Se ha continuado la producción y caracterización de nanopartículas carbonáceas de interés astrofísico mediante plasmas de Ar/He y C₂H₂ generados en un reactor de radiofrecuencias acoplado capacitivamente, diseñado específicamente para tal objetivo. La formación de nanopartículas se ha constatado por las imágenes de dispersión de un haz expandido de radiación láser, recogidas con una cámara CCD. El análisis ex situ por espectroscopía infrarroja del material recogido ha aportado datos sobre su composición. Los plasmas en si se han caracterizado mediante espectroscopía óptica de emisión y, fundamentalmente, por espectrometría de masas de iones y neutros. Se ha elaborado un modelo cinético para explicar los resultados experimentales. Los resultados de este estudio han sido ya publicados en el presente año.

Se ha profundizado en el estudio de la formación de compuestos análogos a los del polvo interestelar utilizado plasmas producidos en descargas inductivas y capacitivas de radiofrecuencia con mezclas de He/Ar como gases de llenado y CH₄/C₂H₂ como precursores. Los plasmas así generados han sido caracterizados “in situ” por espectrometría de masas y espectroscopía óptica. Las muestras de carbono amorfo hidrogenado formadas, consisten en películas delgadas o bien depósitos de polvo, según el método de producción. Tales muestras se han caracterizado ex situ con espectroscopía infrarroja, encontrándose diferencias significativas en sus absorciones, dependiendo del método de producción. Además, en colaboración con el Laboratorio de Hielos del Departamento de Física Molecular, se ha abordado el estudio de la adsorción y desorción térmica programada sobre dichos depósitos de distintos gases de interés astrofísico. Los comportamientos obtenidos se han podido comparar con los de otros materiales, a partir de datos bibliográficos, lo que ha permitido elaborar un modelo sencillo para racionalizar dichos resultados, y proceder a su publicación.

Dentro del proyecto europeo Nanocosmos, se ha seguido colaborando en la caracterización espectroscópica de los plasmas generados mediante pulverización catódica (sputtering) en la máquina Stardust, con el objetivo de contribuir en la simulación experimental de generación de nanopartículas de polvo de distintas composiciones por procesos similares a los que ocurren a nivel interestelar, y el estudio exhaustivo de los mismos. En particular, durante 2019 se han analizado los resultados obtenidos con blancos de grafito, utilizando Ar puro como gas de llenado, o bien con pequeñas concentraciones de H₂ han demostrado que las nanopartículas así generadas presentan un carácter predominantemente alifático, con ausencia casi absoluta de componentes aromáticas, y que los compuestos aromáticos aparecen solamente tras un proceso de calentamiento. Tales conclusiones pueden conducir a una revisión de los mecanismos propuestos hasta el momento para los envoltorios circunestelares.

Dentro de la caracterización de sistemas astrofísicos igualmente se ha venido trabajando con filosilicatos, esto es arcillas expansivas que no solo podemos encontrar en el planeta Tierra sino en otros astros del Sistema Solar, tales como el planeta Marte o el planeta enano Ceres. Se ha trabajado desde un punto de vista teórico, mediante simulaciones con métodos de primeros principios, y experimental, con la preparación de muestras y su análisis mediante espectroscopía infrarroja. Estudiamos la interacción con aminoácidos y la posible supervivencia de los mismos una vez adsorbidos por el mineral en entornos hostiles sometidos a una fuerte radiación ultravioleta o térmica. Los filosilicatos utilizados han sido, sobre todo, esmécicas y montmorillonitas, junto a partículas que varían desde 2 hasta 50 μm de cuarzo, feldespato, calcita, óxidos de hierro y aluminio, silicio, yeso y aragonito. Se ha seguido, manteniendo la colaboración con la Dra. Ana María Fernández del CIEMAT.

FLUIDODINÁMICA MOLECULAR

Durante 2019 hemos continuado con el estudio cuantitativo de flujos de gases fuera del equilibrio, ampliando el rango de temperaturas hasta 900 K. Los chorros supersónicos de gases son un medio extraordinariamente fértil en dinámica de fluidos, donde es factible el estudio de las colisiones moleculares inelásticas, el mecanismo fundamental de transferencia de energía en gases. Para ello en el laboratorio de Fluidodinámica Molecular contamos con 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.

Se ha concluido el estudio experimental exhaustivo de las colisiones inelásticas de H₂:H₂ en el intervalo térmico de 20 a 300 K, partiendo de medidas muy precisas de densidades y poblaciones rotacionales en chorros supersónicos de H₂, realizadas en nuestro laboratorio mediante espectroscopía Raman. Los datos experimentales se han analizado mediante el formalismo de la Ecuación Maestra cinética, derivada de la ecuación de Boltzmann generalizada para gases moleculares. Para ello se han empleado varios conjuntos de coeficientes de transferencia para colisiones inelásticas, calculados teóricamente y publicados en la literatura, con los que se han simulado los datos experimentales. Escalando los coeficientes que mejor reproducían los datos experimentales, se ha obtenido un conjunto de coeficientes de transferencia óptimos, que reproducen los más de 50 datos experimentales de gradientes de población con una desviación estándar < 1,4 % en todo el rango térmico de 20 a 300 K. Para ello ha sido necesario un análisis minucioso del flujo supersónico que ha permitido extrapolar las medidas hasta la región de estancamiento dentro de la tobera. Del trabajo se concluye también que el problema de no-equilibrio térmico en H₂ no admite simplificaciones porque la cinética colisional es altamente no lineal, dependiendo críticamente de la rotura del equilibrio local entre la rotación y traslación moleculares.

Asimismo, se ha concluido el análisis de las colisiones inelásticas de O₂ con He, a partir de las medidas en nuestro laboratorio de la evolución temporal de las poblaciones rotacionales de O₂ en 3 chorros supersónicos de mezclas con He. Para la interpretación de los experimentos se utilizó el formalismo de la Ecuación Maestra cinética, empleando los coeficientes de transferencia por colisiones inelásticas calculados por el grupo INTERMOL del IFF-CSIC. Este análisis ha permitido validar los coeficientes calculados teóricamente, y confirmar que, para temperaturas mayores que 10 K, se puede ignorar la estructura fina del espín electrónico del O₂, lo que simplifica enormemente la dinámica colisional.

En cuanto al desarrollo instrumental, se ha continuado con la optimización de una tobera de alta temperatura, con el fin de estudiar la relajación vibracional de especies como CO₂, proceso de gran importancia en el balance radiativo de la atmósfera terrestre, así como de la de Venus y Marte. El calentamiento se produce mediante resistencias eléctricas, con las que se ha conseguido llegar hasta 900 K. El bloque portatobera va aislado de su soporte mediante un espaciador refrigerado por agua, para evitar posibles daños a los microposicionadores y demás componentes sensibles de la cámara de expansiones. Aun así, ha habido que superar problemas de calentamiento en los elementos ópticos cercanos a la tobera que impedían la imprescindible estabilidad del instrumento. Una vez superados, se han realizado medidas de densidades y temperaturas rotacionales y vibracionales en chorros de CO₂ desde toberas a 800 K y a temperatura ambiente, este último como referencia para su análisis. En las medidas realizadas se observa una gran rotura térmica entre la vibración (~600 K) y la rotación (~200 K), pero no así entre ésta y la traslación.

Por otra parte, se han realizado pruebas para medir mediante espectroscopía Raman el campo de flujo (temperaturas y densidades) en torno a un menisco de agua que se evapora. El proceso de evaporación está bien caracterizado desde el punto de vista macroscópico, pero no se conoce con precisión el mecanismo a escala microscópica. Es este experimento es crítico mantener un tamaño constante de la gota, por lo que se ha diseñado un sistema de inyección fina regulable. En las primeras medidas realizadas en aire se ha observado un ligero enfriamiento del H₂O evaporada respecto de la temperatura ambiente.

En los aspectos metodológicos se ha progresado considerablemente en la comprensión de la dinámica n-LTE (non local thermal equilibrium) y su implicación sobre algunas magnitudes físicas gas-dinámicas. En particular se ha logrado formular con carácter general, por primera vez que sepamos, la capacidad calorífica de un gas en condiciones n-LTE en función exclusivamente de las poblaciones de los niveles de energía moleculares. Esto abre la puerta a su determinación espectroscópica directa. Como consecuencia inmediata de la nueva formulación, el coeficiente adiabático $\gamma = C_p/C_v$, ampliamente empleado en las ecuaciones de Navier-Stokes, pasa de ser una magnitud molecular dependiente solo de la temperatura (en condiciones LTE) a depender fuertemente, en condiciones n-LTE, de la rotura de equilibrio entre grados de libertad traslacionales e internos. Esto explica la habitual falta de precisión de las ecuaciones de Navier-Stokes en condiciones n-LTE. Otras magnitudes en las que se ha profundizado con éxito son los tiempos de relajación y la viscosidad de volumen, habiendo logrado reformularlos de forma concisa en función de las tasas de colisión inelásticas, lo que permite su obtención directa a partir del experimento espectroscópico en jet. Por último, se ha desarrollado un método original para obtener la temperatura traslacional a lo largo de la expansión supersónica en función de las poblaciones y densidades numéricas experimentales, combinados con tasas de colisión inelásticas obtenidas de primeros principios. El método se ha verificado para expansiones de hidrógeno molecular con resultados óptimos.

Por último, siguiendo con la colaboración con el Departamento de Química y Física Teóricas del IEM (M. L. Senent), se han registrado en el laboratorio los espectros Raman del formiato de metilo (HCOOCH_3) natural, tanto en fase gaseosa estática como en expansión supersónica con gases nobles, y de su isotopómero deuterado DCOOCH_3 gaseoso en estático. El formiato de metilo es una molécula de interés astrofísico, presente en las regiones de formación de estrellas, y relacionada con el dimetil-éter analizado con éxito en nuestro grupo el año pasado. Como en esta molécula “hermana”, la región de los sobretonos torsionales es muy compleja por el acoplamiento con la flexión del esqueleto COC y la presencia de numerosas bandas calientes, lo que ha impedido hasta la fecha asignar con seguridad esos modos, imprescindibles para su detección en el medio interestelar.

ESPECTROSCOPÍA LÁSER

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

El grueso del trabajo realizado durante el año 2019 en el Laboratorio de Espectroscopía Láser ha sido continuación de los experimentos ya iniciados en 2018, cuyo objetivo era el de obtener parámetros experimentales de ensanchamiento y desplazamiento de las primeras líneas del espectro Raman de rotación pura de la molécula de hidrógeno monodeuterada (HD) en el sistema colisional HD-He para su comparación con los obtenidos por otros investigadores a través de simulación y métodos computacionales. Estos experimentos, a su vez, forman parte de una línea de trabajo ya iniciada en 2017 sobre colisiones en los isotopólogos del hidrógeno con el estudio del sistema $\text{D}_2\text{-He}$.

Los sistemas de tipo $\text{H}_2(\text{HD}, \text{D}_2)\text{-He}$, al estar formados por un isotopológico de la molécula estable más ligera y por el átomo inerte más ligero conocidos, constituyen pares colisionales relativamente simples. Esta simplicidad es beneficiosa desde dos puntos de vista: por una parte, se consideran sistemas patrón (*benchmark*) para el estudio de los procesos de transferencia de energía colisional en su forma más “pura”, evitando la complejidad añadida que traen moléculas y colisionantes más pesados, reactivos o con más grados de libertad (por ejemplo, colisionantes moleculares en lugar de atómicos). Por otra parte, y precisamente por esta menor complejidad, desde el punto de vista de la realización de cálculos y simulaciones el coste computacional es bastante menor en estos sistemas. Esto permite realizar avances más rápidos en los refinamientos que se realizan tanto los métodos de cálculo como en las superficies de energía potencial que describen las interacciones, y que se van introduciendo de forma progresiva a través de la comparación simulación vs. experimento.

Los experimentos realizados durante el año 2018 en nuestro laboratorio en este sistema colisional ya produjeron resultados iniciales, fundamentalmente en forma de coeficientes de ensanchamiento y desplazamiento de las primeras líneas del espectro Raman de rotación pura del HD a diferentes temperaturas (77, 195 y 298 K). A principios de 2019 se procedió a comparar estos resultados con los obtenidos por los grupos extranjeros especialistas en simulación de procesos colisionales con los que mantenemos colaboración, liderados por los profesores F. Thibault (Universidad de Rennes) y P. Wcislo (Universidad de Torun). De esta comparación se determinó la necesidad de realizar medidas adicionales a otras presiones y con diferentes concentraciones parciales de molécula activa (HD) y colisionante para disponer de un conjunto de datos más completo. Finalmente, y tras la realización de esta nueva ronda de medidas a lo largo de la primera mitad de 2019, puedo construirse una comparación satisfactoria entre los coeficientes de ensanchamiento y desplazamiento observados y calculados, algunos de los cuales se presentan en la figura adjunta. Esta comparación, junto con todos los demás resultados experimentales y productos de simulación que la acompañan, han sido aceptados recientemente para su publicación en la revista *Molecular Astrophysics*.

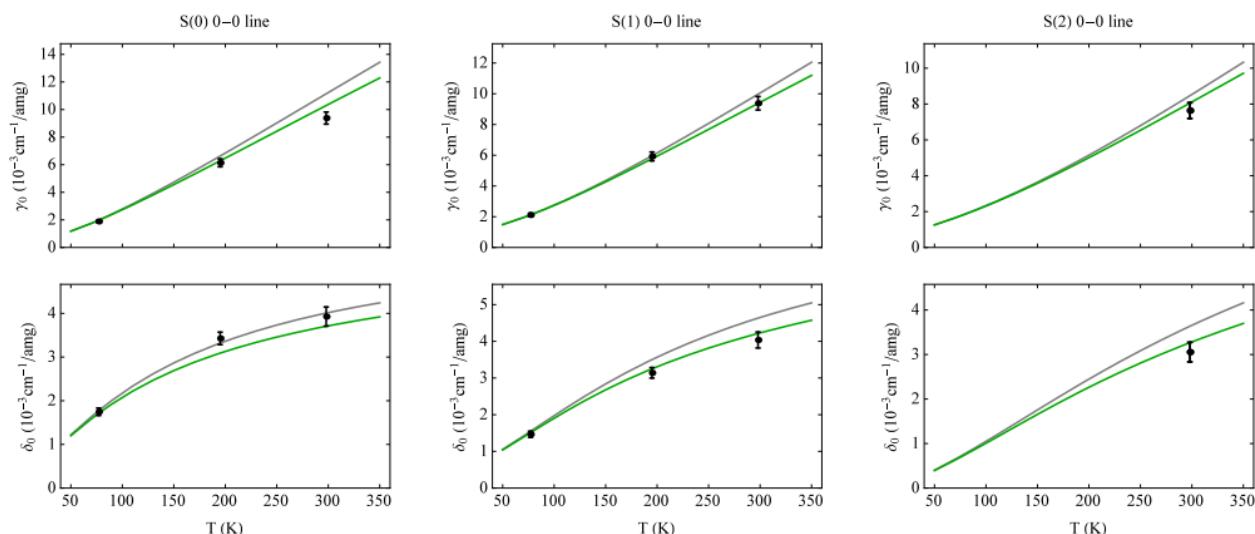


Figura 1: Comparación entre los coeficientes de ensanchamiento (γ_0) y desplazamiento (δ_0) observados (puntos) y calculados (líneas) para las líneas S(0), S(1) y S(2) del espectro Raman de rotación pura del HD perturbado por He y su variación con la temperatura.

Finalizados los experimentos en el sistema HD-He, se iniciaron las medidas preliminares necesarias para la preparación de un nuevo experimento encaminado a la medida de parámetros colisionales, en este caso en el sistema CO-N₂. Esto ha incluido medidas del espectro Raman rovibracional de la molécula de CO a diferentes presiones, temperaturas y concentraciones relativas de CO/N₂, así como medidas de la velocidad de difusión de las moléculas en estas mezclas, con objeto de determinar las condiciones óptimas para la realización de los experimentos, que se espera puedan llevarse a cabo en la primera mitad de 2020.

FÍSICA MOLECULAR TEÓRICA

Modelización atomística y caracterización experimental de minerales, arcillas, silicatos, oxalatos y fases secundarias del combustible nuclear gastado

En primer lugar, para comprender la supervivencia de los componentes básicos de la vida, como los aminoácidos en entornos espaciales, se han realizado una serie de investigaciones teórico experimentales basada en espectroscopía infrarroja de la adsorción de aminoácidos glicina y alanina en muestras de bentonita (Wyoming).

Igualmente, por medio del acuerdo de colaboración que había suscrito entre el IEM y el CIEMAT para la “Caracterización experimental y teórica de fases secundarias y óxidos de uranio”, se ha venido desarrollando una labor investigadora por parte de ambas instituciones en óxidos de uranio tales como la schoepita, metaschoepita, bequerelita y urafonana. En la Unidad de Residuos Radiactivos de Alta Actividad (URRAA) del CIEMAT se ha descrito la estructura cristalográfica de estos minerales y se han registrado sus espectros infrarrojo y Raman, acuerdo que está en fase de renovación. En este marco el IEM-CSIC se ha llevado a cabo la simulación atomística de sólidos periódicos basadas en la teoría del funcional de la densidad (DFT) en el contexto de ondas planas y pseudopotenciales de los mismos, con el objetivo de la obtención de difractogramas de Rayos-X, como asimismo la obtención de espectros Infrarrojo y Raman, que han sido comparados con los obtenidos experimentalmente. E incluso en la parte de simulación se ha ido algo más lejos con la descripción de las propiedades mecánicas de estas fases minerales en minerales tales como el uranilo, la metasoepita o la bequerelita.

Control cuántico de alineamiento y orientación en moléculas aisladas y gases dipolares ultrafríos

El teorema de no clonación de la mecánica cuántica establece que un estado cuántico arbitrario y desconocido no puede ser copiado. El descubrimiento de este teorema, de gran importancia para el desarrollo de la Teoría de Información Cuántica, se atribuye a Wootters, Zurek y Dieks, que en 1982 publicaron sendos artículos de forma independiente. Sin embargo, Park había publicado en 1970 una demostración completa, que ha pasado desapercibida hasta ahora. Hemos presentado en una publicación un análisis del contexto histórico que llevó a las formulaciones más conocidas del teorema y especulado sobre las causas que llevaron a ignorar la demostración de Park.

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 microestrucción de superficies poliméricas.
- Electrónica orgánica.
- Nanoindentación en materiales poliméricos.
- 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.

TÉCNICAS UTILIZADAS:

- Dispersión y difracción de rayos X a ángulos grandes (WAXS), pequeños (SAXS), ultra-pequeños (USAXS) y con incidencia rasante (GISAXS), incluyendo el uso de micro- y nano-haces de radiación sincrotrón.
- Calorimetría diferencial de barrido (DSC).
- Dispersión cuasielástica de neutrones (IQNS).
- Microscopía óptica y de barrido (SEM).
- Espectroscopía Raman.
- Nanoindentación.
- Dispersión de neutrones.
- Espectroscopía dieléctrica de banda ancha.
- Reometría de cizalla en torsión dinámica y continua, de extrusión capilar y elongacional.
- Microrroelogía
- Análisis dinamo-mecánico en flexión.
- Análisis mecánico-dinámico en tracción, flexión y compresión: módulo elástico.
- Microscopía electrónica de barrido y transmisión (STEM).
- Cromatografía de permeabilidad en gel (GPC) y tetrade detección y dispersión dinámica de luz láser (DLS).
- Litografía de nanoimpresión (NIL).
- Espectroscopía de correlación de rayos X (XPCS).
- Micro-espectroscopía de rayos X en transmisión con barrido (STXM).
- Simulaciones mediante uso de computación de alto rendimiento.
- Microscopía de fuerzas atómicas (AFM).
- 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 NANOESTRUCTURA Y PROPIEDADES MECÁNICAS DE SISTEMAS POLIMÉRICOS (NANOPOL)

ESTUDIOS DE NANOINDENTACIÓN SOBRE EL EFECTO DEL GRAFENO EN LA FLUENCIA MECÁNICA DE POLÍMEROS ELASTOMÉRICOS

La nanoindentación, o indentación instrumentada (II), supone, hoy en día, una herramienta fundamental para la caracterización mecánica de superficies de diversa naturaleza. Para materiales blandos (módulo, $E \ll 1 \text{ GPa}$), la determinación de propiedades mecánicas fiables representa un reto en sí mismo. En colaboración con el grupo de la Prof. M. A. Gómez-Fatou (ICTP-CSIC), se ha investigado el comportamiento mecánico de una serie de nanocomuestos elastoméricos de poli(estireno-b-etileno-co-butileno-b-estireno) (SEBS) y grafeno. El estudio se ha realizado empleando la técnica de nanoindentación con un indentador cilíndrico plano, ya que facilita la detección de la superficie de las muestras, un aspecto crítico para estos sistemas dado su bajo módulo elástico ($E < 100 \text{ MPa}$). Los nanocomuestos contienen pequeñas cantidades de grafeno, modificado con cadenas cortas de polietileno (PE) o poliestireno (PS), para optimizar la interacción con la matriz, y presentan propiedades electromecánicas. El objetivo del trabajo fue doble: por una parte, los resultados experimentales sirvieron para validar una serie de modelos, que describen de forma general un comportamiento visco-elastoplástico, para el caso particular de sistemas muy blandos. Por otra parte, se estudió la influencia de la presencia de grafeno sobre las propiedades mecánicas y la importancia de la naturaleza de las cadenas cortas ancladas a su superficie.

La fluencia, entendida de forma general como la respuesta viscoelástica y/o viscoplástica a un esfuerzo continuado en el tiempo, fue analizada utilizando diversos modelos (constitutivos y fenomenológicos). Se pudo constatar que la geometría del indentador permite establecer un intervalo de pesos aplicados en el que se respetan las condiciones de viscoelasticidad lineal. Por encima de este intervalo, la fluencia viscoplástica aparece a un ritmo mayor que la viscoelasticidad lineal. Asimismo, se pudo observar que el grafeno reduce considerablemente la velocidad a la que el material cede frente al esfuerzo, siendo esta reducción más efectiva en el régimen viscoplástico. Además, también se constató que las cadenas cortas de PE ancladas a las láminas de grafeno mejoran considerablemente la resistencia a la fluencia, respecto a las de PS, especialmente en el régimen de viscoelasticidad lineal. Finalmente, se comprobó que los valores del módulo elástico obtenidos por indentación mediante diferentes métodos eran consistentes con los obtenidos mediante técnicas macroscópicas tradicionales. El trabajo ofrece una ruta muy conveniente para analizar las propiedades mecánicas visco-elastoplásticas de materiales muy blandos.

INFLUENCIA DE LAS CONDICIONES DE ELECTROHILADO SOBRE LA MORFOLOGÍA DE TEJIDOS DE POLI(HIDROXIBUTIRATO) Y SU INFLUENCIA EN EL ENVEJECIMIENTO FÍSICO

El poli(hidroxibutirato) (PHB) es un polímero biocompatible y biodegradable con multitud de potenciales aplicaciones en el campo de la biomedicina. Sin embargo, sus propiedades mecánicas se deterioran con el simple almacenamiento debido a un envejecimiento físico cuyo mecanismo sigue siendo, hoy en día, objeto de debate. En colaboración con el Dr. Romo-Uribe (R&D Johnson & Johnson Vision Care Inc., Jacksonville, USA), se prepararon una serie de tejidos de PHB mediante electrohilado, similares a los que podrían servir de andamios para la regeneración tisular, y se almacenaron 11 meses a temperatura ambiente. El objetivo del trabajo era establecer relaciones entre las condiciones del proceso de electrohilado, y la morfología, mojabilidad y estructura del tejido. Esta última fue investigada, a su vez, en función del tiempo de almacenamiento.

Se pudo comprobar que las condiciones de electrohilado determinan la morfología del tejido, que puede ser muy homogénea, con fibras de diámetro muy parecido, o presentar agregados que parecen surgir de la fusión de material. Estudios de microscopía electrónica de barrido revelaron que los tejidos de mayor homogeneidad estaban formados por microfilamentos cilíndricos con una rugosidad muy pequeña en la superficie, mientras que en los tejidos más inhomogéneos, las fibras muestran una porosidad bastante significativa. Además, la mojabilidad resultó ser una función de la morfología, y los tejidos con mayor porosidad mostraron una menor mojabilidad al agua. Más aún, se encontró que la morfología también afectaba a la variación del grado de cristalinidad con el tiempo de almacenamiento. Para el tejido homogéneo, se observó que la cristalinidad aumentaba con el tiempo, mientras para el tejido con agregados, no se observó ningún cambio apreciable. El trabajo ofrece interesantes correlaciones entre las condiciones de electrohilado, la morfología y la afinidad al agua que, a su vez, están relacionadas con el comportamiento de la estructura durante el almacenamiento y cuyo conocimiento es necesario para un posible diseño de andamios biomiméticos.

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

EFFECTOS DE CONFINAMIENTO EN NANOHILOS DE POLÍMEROS SEMICONDUCTORES Y SUS MEZCLAS FOTOVOLTAICAS

La comprensión del comportamiento de los sistemas en la escala de los nanómetros es un paso crucial para el desarrollo de la nanotecnología. En este sentido se han estudiado los fuertes cambios inducidos, por confinamiento, en la microestructura del polímero semiconductor PBTTT y su mezcla fotovoltaica con el derivado de fulereno PC₇₁BM. Estos compuestos orgánicos pueden usarse como sistemas modelo para demostrar cuán sensible puede ser esta clase de materiales al confinamiento espacial en escalas de longitud relevantes para dispositivos en nanotecnología. Se ha investigado mediante dispersión de rayos X con nano-haces, usando luz sincrotrón, el confinamiento de nanofilamentos en función del diámetro, entre 25 y 180 nm. Se han evidenciado los efectos del confinamiento espacial mediante la cristalización en diferentes formas cristalinas, la reducción de la cristalinidad, la segregación de fase y la orientación anisótropa de los cristales. Además, también se ha demostrado que el confinamiento es una herramienta eficaz para controlar la textura cristalina en general, incluida la orientación de los cristales tanto del homopolímero PBTTT como de la mezcla fotovoltaica PBTTT/PC₇₁BM.

RELACIÓN ENTRE ESTRUCTURA Y PROPIEDADES EN POLÍMEROS BIODEGRADABLES PARA UNA ECONOMÍA CIRCULAR

Entre los diversos factores que contribuyen a la transición de una economía lineal a una circular, la identificación de “superpolímeros” con excelente resistencia mecánica, propiedades de barrera y cero impacto ambiental, se ha convertido en un reto. Estos nuevos “supermateriales” hacen que el reciclaje sea una opción concreta para la gestión eficiente y ecológica de residuos de plástico. En colaboración con el Departamento de química, medioambiente e ingeniería de materiales de la Universidad de Bolonia, se ha investigado un poliéster 100% biodegradable que presenta unas excepcionales propiedades mecánicas y de barrera a gases como O₂ y CO₂. Estas propiedades inesperadas y sorprendentes se han explicaron en base a la presencia de una microestructura 2D caracterizada por anillos furánicos parcialmente ordenados favorecidos por enlaces de hidrógeno intermoleculares.

MORFOLOGÍA Y PROPIEDADES FERROELÉCTRICAS DE BICAPAS DE POLÍMERO SEMICONDUCTOR/FERROELÉCTRICO.

Los materiales orgánicos están en el centro de nuevas aplicaciones electrónicas con características que no son posibles a partir de materiales inorgánicos como, por ejemplo, flexibilidad, ligereza o bajo coste. La electrónica orgánica tiene también una gran ventaja a la hora de su procesabilidad a bajas temperaturas y a partir de disolución. Esto hace que sea posible revestir con estos materiales orgánicos funcionales cualquier tipo de superficie y de este modo dotarla de propiedades electrónicas. En este sentido se ha estudiado la sinergia entre sistemas poliméricos funcionales con propiedades semiconductoras y ferroeléctricas. Mediante la técnica de ‘spin-coating’ se han preparado bicapas de polímeros ferroeléctricos basados en poli (fluoruro de vinilideno-trifluoroetileno), P (VDF-TrFE) sobre sustratos semiconductores de poli (3-hexil tiofeno). Se ha realizado un estudio sobre la polarización de esta bicapa ferroeléctrica/semiconductor en función del grosor del semiconductor mediante microscopía de piezorespuesta. Los detalles estructurales y morfológicos han sido investigados por una combinación de dispersión de rayos X a alto ángulo y ángulo de contacto. Los resultados obtenidos muestran que la presencia de una capa de polímero semiconductor entre un sustrato de silicio y la capa de polímero ferroeléctrico estabiliza la polarización inducida por un campo externo. Además, hemos observado una disminución del voltaje necesario para obtener un flip en la polarización del polímero ferroeléctrico cuando entre éste y el electrodo hay una capa de polímero semiconductor, lo que constituye una ventaja a la hora de incluir estos sistemas en aplicaciones electrónicas portátiles.

DESARROLLO DE LA ESTRUCTURA EN POLÍMEROS DURANTE UNA IMPRESIÓN 3D

En colaboración con la empresa *FAB control* se ha estudiado el desarrollo de la microestructura en piezas fabricadas mediante impresión 3D. El trabajo experimental se llevó a cabo usando dispersión de rayos X a bajo y alto ángulo simultáneamente durante la impresión utilizando luz sincrotrón. Como material modelo se utilizó el polipropileno isotáctico (iPP), que es un polímero básico y con gran potencial como materia prima para la fabricación aditiva. El estudio se llevó a cabo utilizando una impresora 3D diseñada a medida para ser utilizada en la línea de luz sincrotrón y realizar los experimentos de dispersión de rayos X in-situ durante la impresión. Los resultados obtenidos revelan que existe una variación de la cristalinidad en las diferentes zonas de las capas depositadas, reflejando la importancia de las intercaras o zonas de soldadura. Se observó también una cristalinidad mayor cerca de las esquinas de las piezas fabricadas, atribuyendo este efecto a una desaceleración del cabezal de impresión.

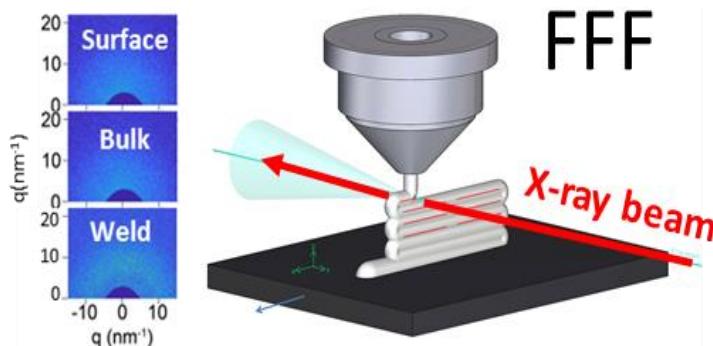


Fig. 1 Esquema del sistema experimental implementado en la línea NCD del sincrotrón ALBA (Cerdanyola del Vallès, Barcelona (Spain)) para la investigación de polímeros procesados mediante manufacturación aditiva (Impresión 3D). Parte izquierda: Patrones “in situ” de difracción de rayos X a ángulos altos en partes significativas de la pieza manufacturada.

BIOCOPOLÍMEROS Y BIOCOMPUESTOS BASADOS EN POLIÉSTERS AROMÁTICOS Y ALIFÁTICOS

La disminución de recursos procedentes de combustibles fósiles, el aumento del precio del petróleo, la emisión de gases efecto invernadero en los métodos estándar de producción de plásticos, así como la limitada biodegradabilidad que presentan estos materiales, está impulsando el desarrollo de lo que se conocen como “biopolímeros” o “bioplásticos”. Éstos son polímeros derivados de recursos naturales renovables o bien polímeros biodegradables. En este sentido, dos polímeros merecen especial atención. El ácido poliláctico (PLA), poliéster alifático que, además de obtenerse de recursos naturales, es biodegradable y la policaprolactona (PCL), que también es un poliéster alifático, biodegradable y que está recibiendo un gran interés por su uso como biomaterial para implantes. En general, los biopolímeros tienen propiedades térmicas, mecánicas y de barrera a gases o vapor de agua inferiores a los polímeros sintéticos, lo cual limita su uso para determinadas aplicaciones. Una alternativa para obviar estas desventajas es la preparación de copolímeros del tipo aromático-alifático. En este sentido, se ha procedido a la síntesis y estudio de propiedades de copolímeros a base de tereftalato de polibutileno (PBT), tereftalato de politrimetileno (PTT), poliácido láctico y policaprolactona. Así mismo, se está llevando a cabo la preparación de biocompuestos obtenidos por incorporación a dichos copolímeros de una serie de aditivos, fundamentalmente formas alotrópicas del carbono.

Grupo de BIOFÍSICA DE SISTEMAS MACROMOLECULARES (BIOPHYM)

RELACIÓN ENTRE SÍNTESIS, ESTRUCTURA Y PROPIEDADES EN POLÍMEROS BIODEGRADABLES PARA UNA ECONOMÍA CIRCULAR

El tereftalato de polietileno (PET) es un polímero no biodegradable cuya degradación hidrolítica puede llevar décadas. Las dos siguientes líneas de investigación tienen la intención de encontrar rutas para incorporar el uso de PET a una economía circular.

Autoensamblaje de copolímeros de PET-mb-poli (oxihexano) en superestructuras doblemente cristalinas

En general, los copolímeros multibloques de doblemente cristalinos exhiben dos temperaturas de fusión bien definidas asociadas con cada una de las fases formadas. En este estudio se demuestra que, a todas las composiciones, se observa una doble cristalinidad, pero la cristalización de los copolímeros se ve fuertemente afectada por la composición relativa de PET y poli -oxihexano. Cuando el material se enfriá desde el fundido, la fase de PET cristaliza primero formando una especie de plantillas superestructurales (esferulitas de tamaño micrométrico). Tras un enfriamiento adicional, se produce la cristalización de las laminillas de poli-oxihexano, dentro de las regiones interlamelares de las esferulitas de PET. Los estudios de microscopía óptica de luz polarizada y microscopía de fuerza atómica demuestran la presencia de una morfología microesferulítica en todo el rango de composiciones. Considerando todos los resultados, incluyendo los SAXS y WAXD dependiente de la temperatura, se concluye la capacidad del poli-oxihexano para cristalizar dentro de las plantillas esferulíticas de PET previamente formadas.

Efecto del poli (ácido láctico L) sobre la cristalización y morfología de copolímeros aleatorios de PET-ran-PLA

En este estudio, el PET se combina con poli (ácido láctico) (PLA), un polímero biodegradable bien conocido, y se investiga el efecto del contenido de PLA en la cristalización del componente PET. Para hacer que el proceso sea sostenible, el PET se polymerizó utilizando monómeros que pueden derivarse del reciclaje químico del PET. La dispersión

de rayos X de ángulo grande y ángulo pequeño (WAXS y SAXS) demuestra que las unidades de PLA interrumpen las secuencias de PET cristalizables, disminuyendo en promedio su grosor laminar, el punto de fusión y la cristalinidad a contenidos relativamente altos de PLA. Si consideramos la degradabilidad de los copolímeros obtenidos junto con la ruta sintética verde utilizada, los copolímeros producidos representan un paso hacia la revalorización de los monómeros reciclados de PET para la producción de materiales sostenibles.

Propiedades de polímeros con nueva arquitectura macromolecular

El metacrilato de glicidilo (GMA) es un monómero que presenta gran interés tanto desde el punto de vista básico como industrial, ya que contiene dos grupos funcionales, un acrilato y un oxirano. Este tipo de monómeros es muy valioso como precursor de polímeros y copolímeros en aplicaciones avanzadas, entre las que destacan la síntesis de copolímeros biodegradables y el desarrollo de portadores de fármacos, genes (terapéuticos) o agentes de diagnóstico, biosensores y estabilizadores e inmovilizadores de enzimas. En esta colaboración con el Departamento de Química Orgánica e Inorgánica de Universidad de Alcalá de Henares, investigamos un enfoque interesante que permite la polimerización controlada de los dos grupos funcionales presentes GMA para originar arquitecturas macromoleculares con propiedades interesantes. El material obtenido muestra propiedades muy sugerentes, como la ausencia total de cristalinidad y un bajo valor de la transición vítrea. Por otro lado, las macromoléculas estudiadas en disolución mediante dispersión de luz presentan alrededor de 10 nm de radio hidrodinámico. Estos resultados, combinados con los obtenidos mediante microscopía de fuerzas atómicas, muestran que, si bien las macromoléculas son esféricas en solución, presentan una morfología aplanaada cuando se depositan en vidrio. Teniendo en cuenta el amplio uso de los derivados de GMA como portadores en aplicaciones biológicas, la posibilidad de preparar unidades de estructura y morfología controlada que también pueden funcionalizarse abre una perspectiva interesante en esta investigación.

Influencia del donador de halógeno sobre la naturaleza del enlace de halógeno en potenciales catalizadores organometálicos

El enlace de halógeno es un tipo de interacción que está despertando un interés creciente debido a sus implicaciones en áreas que van desde la Ingeniería de cristalización hasta el reconocimiento molecular o la catálisis. Un aspecto interesante de estas interacciones es dilucidar la naturaleza real de las diferentes fuerzas presentes en la interacción. Ciertamente, tener una visión más cercana de la naturaleza de la interacción puede conducir a un mayor nivel de control de las propiedades y reactividades.

En colaboración con investigadores de Alcalá, hemos realizado cálculos y análisis teóricos que no solo concuerdan con todas las observaciones experimentales, sino que también permiten comprender la naturaleza del enlace halógeno en función de las moléculas involucradas. En particular, los resultados mostraron que la naturaleza de las interacciones X ... I en $[Ru(CNR)4(X)2] \cdot I_2$ tiene un mayor grado de covalencia que $[Ru(CNR)4X2] \cdot IC_6F_4I$, donde la naturaleza del enlace parece ser puramente electrostática. Por lo tanto, la naturaleza del balance de energía involucrado en la interacción puede dar paso a una elección racional del donante de enlace de halógeno y aunque el componente covalente es mucho más pequeño que el electrostático, puede tener un efecto significativo en la reactividad de las especies formadas. Los resultados serán publicados próximamente.

INVESTIGACIÓN EN BIOMACROMOLÉCULAS

Estudio de la interacción HER2-Trastuzumab

El Trastuzumab es un anticuerpo monoclonal utilizado con éxito como terapia de vanguardia en tumores agresivos que sobreexpresan los receptores HER2. En nuestro laboratorio, y en colaboración con el Hospital Val d'Hebron, hemos explorado la asociación del anticuerpo monoclonal con el dominio extracelular del receptor HER2 donde se encuentra el epítopo putativo. Utilizando una combinación de técnicas experimentales hidrodinámicas y electroforéticas y protocolos de simulación multiescala, pudimos describir el comportamiento estructural y dinámico de los complejos HER2-Trastuzumab en solución acuosa en condiciones fisiológicas. Se ha demostrado que la alta afinidad de las proteínas anticuerpo-antígeno es perfectamente compatible con la alta flexibilidad que se ha observado para dichos complejos.

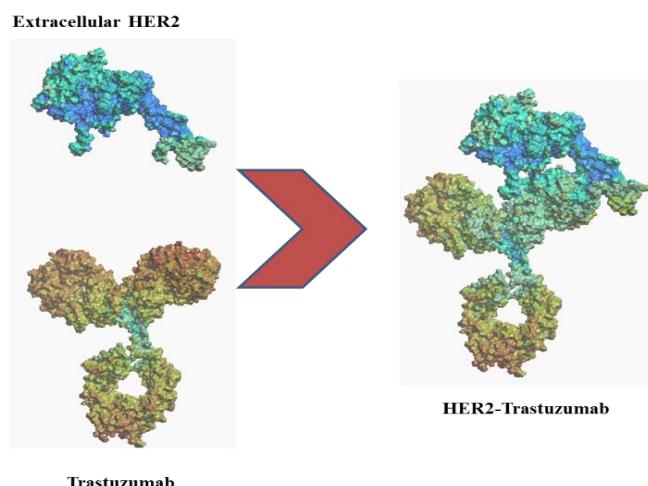


Fig. 2. Ilustración del complejo formado por la interacción entre HER2 y Trastuzumab

Biopelículas eucarióticas de ambientes extremos

El río Tinto es un ambiente extremo acidófilo en el que es posible encontrar una gran riqueza de organismos eucariotas. La mayor parte de estas comunidades se organizan en forma de biopelículas a lo largo de su lecho. Lo que caracteriza a estas comunidades es su metabolismo fotosintético. Una función fundamental de las biopelículas es la protección de estos organismos en las condiciones de estrés extremas a las que están sometidos. Estas biopelículas son complejas y estructuradas, y están principalmente formadas por polisacáridos. Esto hace que un estudio de la relación entre la estructura y las propiedades, como las reológicas, sea de gran interés para entender la ecología de estos sistemas. En este sentido se ha iniciado una colaboración con el Centro de Astrobiología CSIC-INTA para el estudio de las propiedades reológicas de los biofilms eucarióticos fotosintéticos de las aguas acidas extremas de Río Tinto. También se está trabajando en la caracterización de las propiedades físico-químicas de las sustancias poliméricas extracelulares que forman estos biofilms.

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:

- Classical and Quantum General Relativity.
- Loop Quantum Cosmology.
- Quantum Field Theory in Curved Spacetimes.
- Nonlocal gravity.
- Multiscale spacetimes.
- Gravitational waves (LISA Consortium).
- Field theory and geometry.
- Combinatorics and number theory.
- Strongly correlated and mesoscopic 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.
- Geometric Hamiltonian formalism.
- Quantum field theory in curved spacetimes.
- 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**

During 2019, the Gravitational and Cosmology group has progressed in the implementation of the hybrid approach to the quantization of cosmological systems with primordial perturbations in the framework of the formalism of loop quantum gravity. One of the main steps in this hybrid approach is the quantization of the field perturbations by means of a Fock representation. We have investigating a possible way to determine this Fock representation for backgrounds that correspond to flat, homogeneous, and isotropic universes. In more detail, we have explored the possibility of selecting a natural vacuum state for the scalar and tensor gauge-invariant cosmological perturbations in the context of hybrid quantum cosmology by identifying those variables for the description of the perturbations that display a dynamical behavior adapted in a specific way to the evolution of the entire cosmology. We have made use of a canonical formulation of the whole of the cosmological system (background geometry and perturbations) in which the perturbative gauge-invariant degrees of freedom are identified as canonical variables. Introducing background-dependent linear canonical transformations that respect the spatial symmetries of the background on these perturbations and completing those canonical transformations for the entire system, we have been able to characterize a generic collection of annihilation and

creationlike variables that obey the dynamics dictated by a respective collection of Hamiltonians. We have then imposed that such Hamiltonians possess no self-interaction terms so that, in a Fock representation with normal ordering, they act diagonally on the basis of n-particle states. This leads to a semilinear first-order partial differential equation with respect to the background for the coefficients that define the annihilation and creationlike variables for all Fourier modes, as well as to a very precise ultraviolet characterization of them. Such first-order equation contains, in the imaginary part of its complex solutions, the complicated second-order field equation that typically arises for the time-dependent frequency of the perturbations in the context of quantum field theory in curved spacetimes. We have checked that the asymptotic knowledge acquired allows one to select the standard vacua in Minkowski and de Sitter spacetimes. In addition, we have discussed the relation of our vacuum and the standard adiabatic vacua, and checked that our asymptotic characterization of variables with a diagonal Hamiltonian displays the properties that would be desirable for an adiabatic state of infinite order.

Our procedure to select a unique quantum vacuum for the perturbations in the context of hybrid loop quantum cosmology has also been extended to the case of a Dirac field, minimally coupled to the cosmological background and treated as a perturbation. In this way, we have shown that it is possible to obtain a Schrödinger equation for the fermionic degrees of freedom that leads to asymptotically diagonal Heisenberg relations and Bogoliubov evolution transformations, with no divergences in the associated normal-ordered Hamiltonian. For this Dirac field, we have also explored in detail the relation between the Fock representation selected by a criterion of unitary dynamical evolution (introduced in the past by us and weaker than the requirement of asymptotic diagonalization) and those constructed with the familiar adiabatic scheme of quantum field theory in curved backgrounds. We have found that all adiabatic states belong to the family of Fock representations that allow a unitarily implementable quantum evolution (although the converse is not generally true). In particular, this unitarity of the dynamics ensures that the vacua defined with adiabatic initial conditions at different times are unitarily equivalent. We also find that, for all adiabatic orders other than zero, these initial conditions allow the definition of annihilation and creation operators for the Dirac field that lead to some finite backreaction in the quantum Hamiltonian constraint and to a fermionic Hamiltonian operator that is properly defined in the span of the n-particle/antiparticle states, in the context of hybrid quantum cosmology.

Finally, we have also investigated new proposals for the regularization of the Hamiltonian constraint in loop quantum cosmology, focusing our attention on a regularization that has been put forward by Dapor and Liegener. We have quantized the resulting Hamiltonian following a prescription for cosmology proposed by our group in previous years. To this effect, we have first regularized the Euclidean and Lorentzian parts of the Hamiltonian constraint separately in the case of a Bianchi I cosmology. This has allowed us to identify a natural symmetrization of the Hamiltonian which is apparent in anisotropic scenarios. Preserving this symmetrization in isotropic regimes, we have then determined the Hamiltonian constraint corresponding to a homogeneous and isotropic cosmology, which we have proceeded to quantize. We have computed the action of this Hamiltonian operator in the volume eigenbasis and shown that it takes the form of a fourth-order difference equation, unlike in standard loop quantum cosmology, where it is known to be of second order. We have investigated the superselection sectors of our constraint operator, proving that they are semilattices supported only on either the positive or the negative semiaxis, depending on the triad orientation. Remarkably, the decoupling between semiaxes allows us to write a closed expression for the generalized eigenfunctions of the geometric part of the constraint. This expression is totally determined by the values at the two points of the semilattice that are closest to the origin, namely the two contributions with smallest eigenvolume. This is in clear contrast with the situation found for the standard Hamiltonian of loop quantum cosmology, where only the smallest value is free.

Moreover, we have shown that uniformly accelerated detectors can display genuinely thermal features even if the KMS condition fails to hold. These features include satisfying thermal detailed balance and having a Planckian response identical to cases in which the KMS condition is satisfied. We extract the necessary and sufficient conditions for the response function of an accelerated detector to be thermal in the infinitely adiabatic limit. We provide a solid framework to unambiguously analyse the robustness of the Unruh effect against deformations of quantum field theories (perhaps Lorentz-violating). We have also studied the magnitude of semiclassical gravity effects near the formation of a black-hole horizon in spherically-symmetric spacetimes. We calculate the renormalised stress-energy tensor and the effective temperature function. In particular, we analyse the consequences of an oscillation just above the Schwarzschild radius, a monotonous approach towards it in infinite time, and a crossing of at different velocities. For a collapsing matter distribution which follows the expected dynamical evolution in general relativity, we recover the standard picture of black-hole formation and its tenuous semiclassical effects. In more general dynamical regimes, allowing deviations from the standard classical evolution, we obtain a variety of different effects: from the emission of Hawking-like radiation without the formation of a horizon, to large values of the renormalised stress-energy tensor, related to the Boulware vacuum divergence in static spacetimes.

The group has continued working on the geometrical aspects of the Hamiltonian formulation of singular Lagrangian systems, in particular those relevant for the classical study of gravitational theories and their quantization. At the present moment a lot of attention is paid to the understanding of field theories defined in bounded spatial regions. These are relevant in every branch of physics as boundaries are important elements of real systems. In the gravitational setting, for instance, they appear as horizons in black holes and play a very important role in holographic models. They are also of

the outmost importance in theoretical condensed matter physics. The presence of boundaries makes it difficult to get the right Hamiltonian formulations with the standard---and quite formal---methods used so far. One of the problems is the difficulty in dealing with the canonical symplectic structure when boundaries are present. The obvious way out of this type of situation is to rely on geometric methods. Along the years the members of the group (Barbero, Margalef and Villaseñor) have adapted the so called GNH method to the Hamiltonian treatment of field theories with boundaries. During the year 2019 we have developed, in collaboration with Dr. Bogar Díaz Jiménez, a practical geometric implementation of the Dirac algorithm in a way that effectively circumvents the problems that usually arise in the presence of boundaries. One of the reasons why our method works so well is the fact that the dynamical stability of the constraints is interpreted geometrically as a tangency condition of Hamiltonian vector fields in phase space. This allows us to avoid the explicit use of Poisson brackets beyond the initial determination of the Hamiltonian vector fields, hence eliminating some of the usual difficulties in dealing with the presence of boundaries. As an early application of the new method we have studied a rich family of gravitational actions in a four dimensional manifold with boundary and shown how the dynamics in the bulk (with a simple dynamical interpretation as it is given by the field equations of the so-called Husain-Kuchar model) interacts with the dynamics at the boundary (which is given by the Baekler-Mielke extension of general relativity in 2+1 dimensions). At the present moment we are completing the study of several interesting field theories with these new Hamiltonian methods, among them the parametrized version of a Maxwell-Chern-Simons theory for k-forms in arbitrary odd-dimensional spacetimes with boundaries and the parametrized version of unimodular gravity in the Ashtekar formulation.

During the last year the members of the group (Barbero and Villaseñor) in collaboration with Dr. Jesús Salas (UC3m) and Dr. Juan Margalef-Bentabol (Penn State University) have continued their work on combinatorics and related subjects, in particular the use of asymptotic methods to study and characterize the properties of the zero sets of families of polynomials (in particular the Appell polynomials). This work is an interesting byproduct of the work carried out in the past on the study of black hole entropy and the area operator in Loop Quantum Gravity.

In the context of nonlocal gravity, we clarified for the first time the structure of the non-perturbative spectrum of the theory, showing that the graviton is the only physical degree of freedom propagating on flat or Ricci-flat spacetimes (we also proved that such backgrounds are exact stable solutions of the theory). Other degrees of freedom, new with respect to those of general relativity, can propagate on certain curved backgrounds. No ghost mode of local higher-order gravitational theories is present in the physical spectrum, thus guaranteeing the tree-level unitarity of the nonlocal theory.

This year marked the entrance of the group into the LISA Consortium, specifically within the Cosmology Working Group and the Fundamental Physics Working Group. The main scientific activity related to this space-borne experiment, whose start is planned for 2034, was the study of the luminosity distance of gravitational waves of astrophysical origin in modified-gravity theories or in quantum gravity. It is the first time that one tackles the problem of how models like DHOST or quantum-gravity corrections can deform the luminosity distance and with what magnitude of the effect. With the members of the LISA Cosmology Working Group, we studied such effects both at the theoretical level and in numerical simulations using mock catalogs of standard sirens detectable by LISA. The result, published in an official article of the Collaboration, is that indeed there exist some models whose corrections can reach the sensitivity threshold of the instrument. In these theories beyond Einstein gravity, gravitational waves do propagate in a characteristic way that can be discriminated with respect to ordinary physics. In two other papers not belonging to LISA, but written in collaboration with LISA and LIGO members, we explored these details within the context of a wide class of theories of quantum gravity.

THEORETICAL NUCLEAR PHYSICS

Weak decays in superheavy nuclei

Half-lives of beta decay and electron capture processes are studied in some selected superheavy nuclei produced in hot-fusion reactions. The nuclear structure is described microscopically from deformed self-consistent Skyrme Hartree-Fock mean-field calculations that include pairing correlations. The sensitivity of the half-lives to deformation and to the Q-EC energies, which are still not determined experimentally, are studied. The results are compared with phenomenological alpha-decay half-lives, showing that the latter decay mode is dominant in this mass region.

The search of new regions of nuclear stability in superheavy nuclei is a very active and successful line of research that has already led to the discovery of a large number of new elements. First calculations of binding energies within macroscopic-microscopic models predicted the existence of "islands of stability", confirmed later by more fundamental calculations. In parallel, different experimental strategies were successfully carried out to reach the theoretically predicted "islands of stability" for superheavy nuclei. The cold-fusion approach was used first to synthesize nuclei with Z=107-112. A second strategy was developed later, using more asymmetric reactions with both target and projectile having a large neutron excess. These so called hot-fusion reactions result in the production of nuclei with Z=112-118. Nearly all the new nuclei produced in the hot-fusion reactions undergo a chain of alpha decays ending with a spontaneous fission.

Identification of the associated alpha-decay chains is the link to establish the original superheavy nucleus produced in the reaction.

On the other hand, the nucleus formed or some of its decay products could also decay by electron capture and beta-decay converting a proton into a neutron. Therefore, it is of great interest to study the competition between beta/EC and alpha decays in superheavy nuclei produced in hot-fusion reactions. These new decay branches would open the possibility of reaching other superheavy nuclei not belonging the original alpha-decay chains. In our work the focus of attention is the beta/EC decay mode in superheavy nuclei that so far has been studied only at a phenomenological level. We calculate the decay microscopically from an effective nucleon-nucleon interaction within a deformed selfconsistent mean-field Hartree-Fock calculation with Skyrme forces and pairing correlations in the BCS approximation. Taking into account all the uncertainties in the results from both alpha and beta/EC decays, it is found that the half-lives of the latter are much larger than those of the former and therefore, there is in general no room for beta/EC decay to play a role in the decays of the superheavy nuclei produced in hot-fusion reactions.

Nuclei as three-body systems with mean field interactions

An important aspect of the work recently developed has been the implementation of a new method that permits to construct the interaction between clusters from a standard mean field calculation. More precisely, the idea has been to take into account the structure of the core in order to build a mean field interaction, which the one felt by the halo nucleons. In this way, few- and many-body degrees of freedom are combined in a new computationally efficient model applicable to both bound and continuum states and adaptable to different subfields of physics. We formulate a self-consistent three-body model for a core nucleus surrounded by two valence nucleons, where the core is treated in the mean-field approximation and the same effective Skyrme interaction is used between both core and valence nucleons. We apply the model to ^{26}O , where we reproduce the known experimental data as well as phenomenological models with more parameters. The decay of the ground state is found to proceed directly into the continuum without effect of the virtual sequential decay through the well-reproduced $d_{3/2}$ resonance of ^{25}O . We have also investigated two-proton radiative capture reactions by means of the ^{68}Se nucleus, investigating, in particular, the capture mechanism of the process. We have observed that, when possible, the sequential mechanism is preferred to the direct capture reaction. Finally, the ^{70}Ca nucleus has been used to investigate the appearance of halo structures when the neutron dripline is progressively approached. In the same work we have studied under what conditions nuclear excited states can be considered as Efimov states. More recently, the applicability of the method to nuclei in the vicinity of the valley of stability has been investigated. We have found that the clusterized structure of the systems is not imposed by the method, but it appears naturally when approaching the neutron or proton driplines.

Confinement of two- and three-body systems

Along this year we have also investigated two- and three-body systems when the dimension changes in a continuous way from three (3D) to two (2D) and to one (1D) dimensions. This amounts to confining the particles into a narrower and narrower layer, such that, eventually, when the layer has zero width, the particles are forced to move either in 2D or in 1D. In practice, this can be done by putting the particles under the effect of an external trap potential confining the particles in the space. In particular, this can be done by means of a harmonic oscillator potential in the z-coordinate (for 3D to 2D) or in the perpendicular coordinate (from 3D to 1D).

For two-body systems the numerical implementation of the external field is simple, and it does not present particular problems. However, for three-body systems, although conceptually the procedure is exactly the same, the numerical difficulties increase when the frequency of the harmonic oscillator increases. In fact, for very large frequencies, i.e., when approaching 2D, the method is quite inefficient. For this reason, in our work we propose to implement the confinement of the particles, not by means of an external potential, but by introducing the dimension d as a parameter in the Schrödinger (or Faddeev) equations to be solved. The dimension is then allowed to take non-integer values within the range $2 \leq d \leq 3$. The purpose of this work is twofold. First, we want to see the connection between the two confinement methods mentioned above. It is necessary to see the equivalence between a given value of the confining harmonic oscillator frequency and the dimension d describing the same physical situation. Once this is done, we shall use the second method, which is numerically much simpler, to investigate the Efimov states in mass imbalanced systems, focusing in particular on how those states disappear when increasing the confinement of the particles.

CONDENSED MATTER THEORY

Topological semimetals in external fields

Topological materials have attracted great interest in the last decade since they exhibit new fundamental phenomena and hold great promise for far-reaching technological applications. Gapless systems assemble the family of topological semimetals, where the valence and conduction band only touch at a zero-measure set of points in the Brillouin zone. Topological Weyl and Dirac semimetals are three-dimensional phases of matter in which these isolated touching points are protected by topology and symmetry. Near these nodes, the dispersion relation appears as a three-dimensional

analogue to Graphene and can be described by an anisotropic version of the Weyl or Dirac equation so the low-energy quasiparticles behave as relativistic fermions. One of the main manifestations of the topological properties is the presence of surface states in bounded regions of the momentum space. The understanding of the effect of external fields on the topological phases and transport phenomena is a field of great interest both from a first principles standpoint and from the perspective of possible applications. We have studied the effect of external fields in the most direct manifestation of topology, i.e., the surface states. In the case of an electric field applied perpendicularly to the surface of a thin film of topological semimetal we have derived analytical expressions based on perturbation theory that describe the modification of the Fermi velocity and the node position as a function of the strength of the electric field. We have confirmed our predictions and also extended beyond the applicability of perturbation theory with detailed numerical calculations. We have also studied the Landau levels of Weyl and Dirac semimetals when a magnetic field is applied. The anisotropy of these materials results in different behavior depending on the direction of the magnetic field. We have identified different parametric regimes for the response of the topological semimetals to a magnetic field.

Electronic transport in twisted bilayer graphene

During 2019 we have developed a proposal to explain the strange metal phase observed in twisted bilayer graphene by the group of Pablo Jarillo-Herrero at MIT. The main feature characterizing that phase is the linear temperature dependence of the resistivity above the superconducting phase found near half-filling of the Moiré superlattice. While it is frequently assumed that the electron-phonon interaction could be responsible for that anomalous behavior, it has been acknowledged that phonons cannot account for the linear dependence down to the lowest temperatures reached in the experiment (~ 0.5 K). Our proposal has served to solve this puzzle, presenting a consistent explanation which is purely based on the electron-electron interaction.

Our key observation has been that the lowest-energy bands of twisted bilayer graphene near the magic angle display two distinct features that dominate the transport properties. These are the Dirac nodes at the charge neutrality point and, on the other hand, a set of extended saddle points which are close to the Fermi level at half-filling of the low-energy valence and conduction bands. We have shown that the decay of the electron quasiparticles in the region of flat dispersion of the saddle points, as well as of those with higher energy (already located in the Dirac cones below the nodes at the K points) can account for the linear temperature dependence of the resistivity. The origin of the linear behavior is however different in the two regimes, forcing the appearance of a crossover which is indeed consistent with the experimental observations by the group at MIT.

Furthermore, we have argued that the linear dependence of the resistivity has to be just one of the many facets revealing the deviation of twisted bilayer graphene from the conventional Fermi liquid picture. The reason for such an anomalous behavior lies in the linear growth with energy of the electron-hole excitations across the Fermi line in the flat region of the saddle points of the dispersion. Our derivation, therefore, can be seen as a concrete realization of the marginal Fermi liquid paradigm, which was developed phenomenologically many years ago to describe the normal phase of the copper-oxide high-temperature superconductors. We have concluded that such an unconventional behavior should have also a reflection in other observable features, like the linear energy scaling of the electron quasiparticle decay rate, or the anomalous temperature dependence of the heat capacity and the thermal conductivity.

Variational reduced density matrix theory for strongly correlated systems

One of the variational approaches for the study of strongly correlated many-body systems is the variational reduced density matrix (VRDM). This method seems to be a promising approach to deal with the complex dynamics of quantum many-body systems at a low computational cost. We have recently applied it with great success to attractive pairing models by implementing a code of semidefinite programming. We have implemented a treatment for the variational determination of the two-particle reduced density matrix arising from doubly-occupied-conguration-interaction N-electron wave functions, using up to four-particle N-representability conditions. These variational constraints are necessary conditions which must be satisfied so that the resulting two-particle reduced density matrix can be regarded as N-representable. The formalism has been presented in terms of hard-core bosons and tested with the spin 1/2 XXZ model as representative model of a strongly correlated system within the class of seniority-zero Hamiltonians. It can also be directly applied to the description of N-electron atomic and molecular systems within the double occupied configuration interaction (DOCI) framework provided the corresponding optimal single-particle basis is constructed. We present the variationally-computed ground-state energies, two-particle reduced density matrix, and correlation functions across a full range of Hamiltonian parameters. The results obtained with the four-particle N-representability conditions show a significant improvement over the previously reported using two- and three-particle N-representability conditions, in spite of the fact that this improvement entails an additional increase of the computational cost. The quality of these results indicates that the four-particle variational constraint conditions improve the quality of the results at an affordable computational cost within the field of application of the DOCI framework.

Integrable modelos of cold atom systems

We introduced an exactly solvable two-species p-wave bosonic model and established its quantum phase diagram in the attractive sector. Only the case of a balanced mixture with equal masses and zero center-of-mass momentum. Q has been studied in depth. Imbalanced binary mixtures and finite Q pairs are contained within our exactly solvable model. The exact, finite and thermodynamic limit, treatments of the p-wave pairing Bose Hamiltonian, although seemingly similar, have profound physical differences from its fermionic counterpart despite the fact that both cases share a third-order quantum phase transition. In the fermionic case the latter separates two gapped superfluid phases and has a topological character. In the bosonic case one of the phases is gapless and displays a fragmented BEC condensate with macroscopic occupations of both species in the lowest finite momentum pair states ($-k, k$), while the other is a gapped pair Bose superfluid. Moreover, while for fermions the critical coupling takes place at the Read-Green point, with one pairon at zero energy and the other pairons with real and negative energies, for bosons the phase transition takes place at the equivalent of the fermionic Moore-Read point with all pairons collapsing to zero energy. It is at this critical point that the exact bosonic ground state is a pair condensate with amplitudes fixed by the single-particle energies. Motivated by a theoretical prediction, recent experiments discovered an ultradilute quantum liquid in ultracold bosonic systems. Apparently, there is no unique mechanism leading to such a liquid state since it has been observed in single-species dipolar systems and Bose (potassium) mixtures. Can one obtain a quantum liquid phase in p-wave Bose systems? This question has been recently addressed, and answered in the affirmative for a particular model. Our Bose superfluid phase represents a number conserving candidate for such quantum liquid phase. The pairing interaction may thus provide an effective mechanism for its emergence. Although the superfluid gap protects that state from expansion in finite geometries, further studies in trapped potentials are required to identify a possible selfbound quantum liquid droplet. On the experimental side, it is crucial to have a precise understanding of the spectrum of excitations to compare to our theoretical predictions.

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

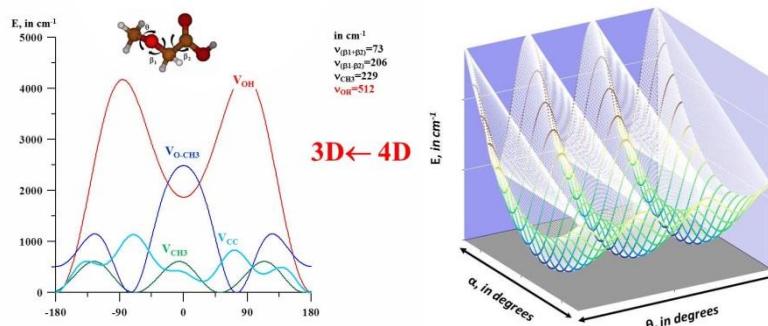
During 2019, the group has developed research corresponding to the projects **FIS2016-76418-P**, **COOPB20364** and **ANR-14-CE33-0013** whose main objective is the study of detectable molecular species in gaseous astrophysical sources and in the terrestrial atmosphere using the theoretical methods of the molecular physics. Some of the species can be classified as Organic Volatile Compound (VOC) and considered important atmospheric contaminants.

Special attention was given to the non-rigid species (MNR) that show several minimums or conformers in the potential energy surface. The conformers, unlike the isomers, are interconverted by large amplitude vibrational motions without breaking or creating chemical bonds. The analysis of their very complex spectra requires specific theoretical models assuming the non-rigidity, such as those that have been developed in the group and are integrated into the ENEDIM program.

The overall objective of FIS2016-76418-P is the spectroscopic characterization at low temperatures of non-rigid, prebiotic and astrophysical molecular species from highly correlated ab initio methods. It is also objective for its astrophysical relevance, the study of carbonated chains type C_n (n=3-8) and type C_nH (n=3-6), as well as its anions and cations. Species, insufficiently characterized at the laboratory level will be prioritized, emphasizing the most difficult aspects to interpret or approach experimentally. Isotopic varieties containing cosmologically abundant isotopes are of interest.

The study of MNR and VOC species is also the objective of the COOPB20364 project, which also addresses existing organic radicals in gaseous sources, photodissociation and formation processes of these species and gas-solid interactions. The project involves groups from the Mohammed V Universities in Rabat, and from the Universities of Tunis el Manar and La Manouba in Tunisia.

With regard to the ANR-14-CE33-0013 (Anion Cos Chem) project, which is coordinated from the University of Rennes and involving several French institutions (Universities of Bordeaux and Le Havre, Observatoires de Paris and Grenoble), the group's participation focuses on collisional calculations and on the spectroscopic characterization of carbon chains of negative charge.



During 2019, the spectra at low temperatures of acetyl isocyanate, methyl cyanoformate, and acetyl cyanate have been studied. In addition, spectroscopic properties have been computed for the CH₃-O-CH₂ radical and for the propyl-cyanide isomers. A new spectral characterization of dimethyl ether isotopologues CH₃OCH₃ and ¹³CH₃OCH₃ in the THz Region based on Raman measurements at different temperatures and ab initio calculations have been achieved in collaboration with researchers of the Molecular physics department. This work allowed the reassignments of the torsional overtones. Studies of the most probable formation processes of methyl formate, propyl cyanate and compounds type H₂C₃O have been performed.

With respect to the carbon chains, an extended study of the C₃H and C₅H (neutral, anion, and cation) allow to confirm the prominent stability of linear forms and three-body cycles. The collisional properties at low temperatures of the C₄H⁺+H₂ system were computed.

Finally, the photodissociation of the ethyl radical using experimental and computational tools and the CH₄, SF₆ y H₂O adsorption in ZIFs, 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
- Computing simulations using R3BRoot for nuclear physics experiments
- Systems devoid of long-range order
- Bionanospectroscopy
- Molecular Detection Based on Optical Spectroscopy on Nanostructures
- Advanced instrumentation
- Spectroscopic techniques for the design, develop and durability of artificial building materials.
- SERS studies of admixture/binder interactions.
- New artificial building materials from recycled waste materials
- Design of sensors based on calcium silicates
- Portable techniques for the study and characterization of ancient and new materials from the Cultural Heritage
- Nano-Photonics.
- Plasmonics and Metamaterials

RESEARCH SUBLINES:

- Experimental studies of light nuclei close to and beyond the driplines
- Beta decay studies of dripline nuclei
- Study of the nuclear break up mechanism by multiparticle detection
- R&D for FAIR (Facility for Antiprotons and Ion Research)
- Study of the structure and dynamics of halo nuclei
- Direct nuclear reactions
- Magnetic moment measurements in exotic nuclei using radioactive ion beams
- Nuclear Instrumentation
- Computing tools in Experimental Nuclear (R3BRoot)
- Data Analysis tools
- Nuclear Physics experiments for FAIR
- Physical behavior at nano-scales
- Microscopic structure and dynamic of disordered condensed matter
- Advanced instrumentation development for neutron sources
- Localized Plasmon resonances in metal nanostructures (nanoantennas)
- Transparent metamaterials
- Metamaterials with HRI dielectric materials
- Semiconductor Nanowire Photonics
- Topological Plasmonics
- Fabrication and functionalization of nanostructures
- Design of Molecular Sensors base don plasmonic spectroscopy
- Biomolecule/Nanostructure Interaction
- Hyperthermia

EMPLOYED TECHNIQUES:

- Beta decay studies at ISOL facilities, ISOLDE.
- 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

- Computational methods
- Numerical simulation
- Neutron Scattering
- Gas adsorption techniques
- Theoretical and mathematical physics
- Raman Spectroscopy (Micro-Raman, portable Raman)
- Fourier-Transform Infrared Spectroscopy (FT-IR)
- Scanning Electron Microscopy - Energy Dispersive X-ray Spectroscopy (SEM/EDX)
- X-ray Diffraction (DRX)
- Differential Thermal Analysis-Thermogravimetry (ATD/TG)

RESEARCH ACTIVITY:

PRONTO-CM project (J.A. Briz, M J G Boerge, O. Tengblad, E. Nácher, A. Perea)

In the framework of the PRONTO-CM Project, the group is performing R&D tasks to develop a prototype of a proton Computerized Tomography (pCT) scanner by using Nuclear Instrumentation. By mid-2020, two new proton-therapy facilities will be operating in Spain, one at the Quirónsalud center and another in Clínica Universidad de Navarra (CUN) both in Madrid. With the advent of this new therapy technique, new developments and improvements are needed to fully exploit its capabilities. One of them is the substitution of X-rays Computerized Tomography (xCT) by proton CT technique for the determination of the treatment plans. In this way, the inaccuracies in the proton ranges of the order of 3% currently obtained with xCT could be reduced down to below 1% using pCT. For this reason, strong efforts are currently ongoing to develop a pCT scanner able to perform properly for clinical treatments. In this scenario, the

Experimental Nuclear Physics is proposing a new prototype for pCT scanner. Thus, the Experimental Nuclear Physics group has been working in the CSIC lab to test, calibrate and set-up silicon strip detectors to be used as proton trackers. A simplified prototype using these silicon detectors was tested in an experiment performed in June 2019 at the Centro de MicroAnálisis de Materiales (CMAM) facility in Madrid. The objective was to test the imaging capabilities of a prototype for pCT scanner composed by two Double-Sided Silicon strip Detectors (DSSDs) used as proton trackers.

There, a 10 MeV proton beam was used to image a set of simple 2D phantoms with different spatial patterns were used to be imaged. The results obtained are very promising showing good spatial resolution and sensitivity to thicknesses and densities as can be seen in the figure below. Even thin (20-30 mm) adhesive film layers used to attach the aluminum cross-shaped pattern shown in the c) image were detected as can be seen in the d) image acquired.

This was a first milestone for the project that will continue in the following 2 years by performing more advanced tests at similar beam energies as those used for protontherapy treatments (100-230 MeV) in national and international facilities with the aim of building an optimized prototype for pCT scanning.

ENSAR2- PASPAG APPLICATION TO THE SIMULTANEOUS DETECTION OF PARTICLE AND GAMMA RADIATION (O. Tengblad, I. Marroquin, E. Nácher, A. Perea)

Novel scintillator materials with γ -n identification that are insensitive to humidity, magnetic field are emerging, coupled with light-weight low-powered sensors like SiPM are ideal to be used in Nuclear Security. The PASPAG collaboration has identified societal applications of our R&D, especially in the case of Nuclear security we are aiming for a lightweight compact detector device that can be carried by an unmanned vehicle (remote-controlled) for measurements in areas of high radiation. It should be equipped with an accurate small sized computer with incorporated geo-location and timestamping systems for wireless communication to a base station. (Nuclear and Particle Physics Proceedings 00 (2019) 1–3)

The Raspberry Pi is a cheap programmable device (with Linux as default operation system), it can be fitted with peripherals such as a camera, GPS and it incorporates wireless LAN and Bluetooth connectivity. In addition, the GPIO (General Purpose Input Output) allow you to connect the Pi to any number of physical extensions. The Raspberry Pi comes with libraries pre-installed in order to access IO using Python, C or C++.

Signals detected are digitized by an onboard ADC and connected to the Pi through the I₂C GPIO pins and transmitted via wireless LAN to the base station.



S444/TEN -- R3B - COMMISSIONING (O. Tengblad, E. Nácher, A. Perea)

In the year 2019 we have prepared for the mounting of detectors for the R3B collaboration and its experiments for the 2019 campaign. The emphasis has been on the identification and tracking of the incoming and outgoing beam/fragment together with CALIFA calorimeter, and its Si-tracker. Further, the Large Area Dipole Magnet, GLAD has been commissioned using beams of defined momentum. All the experimental equipment were incorporated to the NUSTAR DAQ, and calibrations of the detector system has been obtained.

The S444 experiment obtained beamtime during 18-24 February 2019, we got only parasitic ^{12}C beam and mainly during night-time, so only 10% of approved beamtime was delivered. The beamtime was successful, we observed stable operation of CALIFA with threshold in the order of 150-200 KeV. The double-ranged preamps worked as expected. Some noise might be induced by the very long cables, to be investigated in upcoming beamtime in 2020.

Goal 1: Large beam-spot into GLAD at several energies. Obtained data à off-line analysis ongoing Goal2: p2p -correlation AMS-CALIFAA Good tracking 200 μm resolution. According with expectations. Goal 3: reaction cross section ^{12}C on H₂ data was obtained for several energies and targets. The Time stitching of events from different detectors was not perfect, to be worked on.

The commissioning continued over the S473 beamtime in 24-28 February 2019. where only two days beam and only one isotope ^{120}Sn was delivered. However, several targets and energies (200 – 800 AMeV) were measured for ^{120}Sn . In summary, we have collected an important set of data for the understanding of the R3B set-up and performance, off-line analysis is ongoing. 3) We are analyzing and adjusting the system for the next try with upcoming ^{16}O beam (S454) in the first weeks of April 2019.

Summary: The R3B detector set-up is very complexed with several fully independent detector systems that have to work in coherent mode, using very precise timestamping and on-line time-stitching of the data into coincident events. This first beamtime in February has been very important in order to debug and put these pieces together. The system worked surprisingly well from start and we have been able to obtain valuable data, that will help to further improve the system while preparing for the upcoming beamtime.

IS633: ELECTRON CAPTURE OF ^8B INTO THE HIGHLY EXCITED STATES OF ^8Be . CHARACTERIZATION OF THE RESPONSE FUNCTION OF THE DETECTORS USED IN THE IS633 EXPERIMENT (S. Viñals, O. Tengblad, M.J.G. Borge, E. Nácher, A. Perea)

The experiment IS633 aims to study the 2₊ doublet at 16.6 and 16.9 MeV excitation energy in ^8Be populated in the β decay and electron capture (EC) of ^8B . In addition, we are interested on the so far unobserved EC-delayed proton emission from a state at 17.6 MeV.

In this work we characterize the experimental setup used in the first experiment win order to obtain the response function of the detectors. The response function was calculated using the Geant4 simulation tool. The starting point has been the geometry geometry provide by the manufacturer of each of the Double-sided Strip Silicon Detector (DSSD).

The next step has focused on adjust the different components individually for each detector until the response to the calibration source used, which includes the nuclei ^{148}Gd , ^{239}Pu , ^{241}Am and ^{244}Cm , coincides with the experimental spectrum. The adjustment has focused on the monochromatic disintegration of ^{148}Gd and once its spectrum has been reproduced, it has been checked with the other three nuclei present in the source. The agreement between the experimental

calibration spectrum (blue) and the simulated spectrum with the response function (red) for one of the characterized detectors is shown in Fig. 1.

This study allows to continue with the analysis of the experiment using the R-matrix theory, for which it is necessary to know the response function of the detectors. In previous studies a mathematical function was used as the response function. This work is the first in which the experimental effects of a DSSD are reproduced including only physical parameters

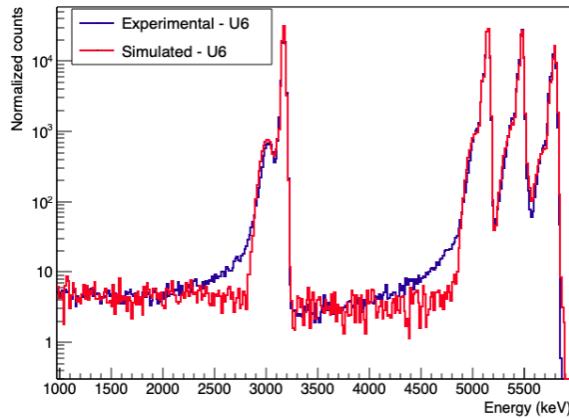


Figure 1: Comparison between the experimental calibration spectrum (blue) and the simulated spectrum with the response function included (red) for the standard 4 α -source

NEAR COULOMB BARRIER SCATTERING OF ^{15}C WITH HEAVY TARGETS AT HIE-ISOLDE, CERN. (J. D. Ovejas, I. Martel, O. Tengblad, M. J. G. Borge et al.)

The weakly bound isotope ^{15}C ($\text{Sn}=1218$ keV) has been investigated in several experiments at high energy. The momentum distributions for the one-neutron breakup shows a narrow component of $67(3)$ MeV/c width only. Furthermore, its interaction cross-section is slightly larger than its neighboring isotopes $^{14,16}\text{C}$. These features suggest the presence of a halo structure. Due to the particular ground-state configuration, ^{15}C would be a unique nuclear system exhibiting a s1/2 single neutron halo.

Aiming to probe this debated structure, the first dynamical study of ^{15}C at energies around the Coulomb barrier was carried out in August 2017 at the HIE-ISOLDE facility at CERN. In order to observe the effects of its structure on the elastic scattering, a ^{15}C beam (with ^{15}N present as contaminant) was produced, purified and post-accelerated up to 4.37 MeV/u and made to impinge on a 208Pb target. The scattered charged particles were measured with the GLORIA detector, consisting of six silicon telescopes with high granularity surrounding the reaction target. These detectors, of a 40 μm (front stage) + 1 mm (back stage) thickness, show an angular coverage from 15 to 165° with a resolution of $2\text{-}3^\circ$ and a 25% of geometric efficiency.

Monte Carlo simulations to reproduce the energy losses in the experimental set-up have been developed. Charge-sharing events between the silicon strips have been studied, as well as the channeling effect of the beam contaminant over the ^{15}C . The reaction point from which to calculate angles and solid angles has been optimized too.

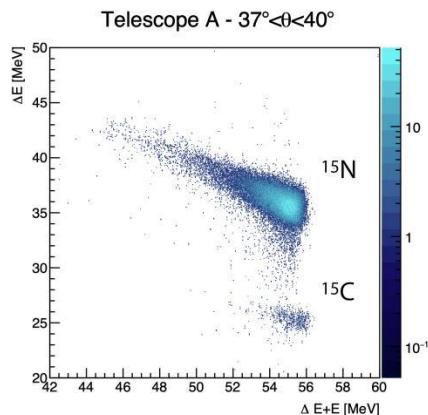


Figure 2. Mass spectrum ΔE - E_{rot} for an angular sector of $\Delta\theta=3^\circ$ in telescope A. Both the two elastic scattered isotopes can be well separated. Charge-sharing events have been removed, as well as the pixels with a remarkable channeling effect.

EXPERIMENT NP1012-RIBF61: THE PYGMY RESONANCE IN TIN ISOTOPES STUDIED BY INELASTIC ALPHA SCATTERING (FPA2017-84756-C4-2-P, PostDoc Victor Vaquero, Andrea Jungclaus)

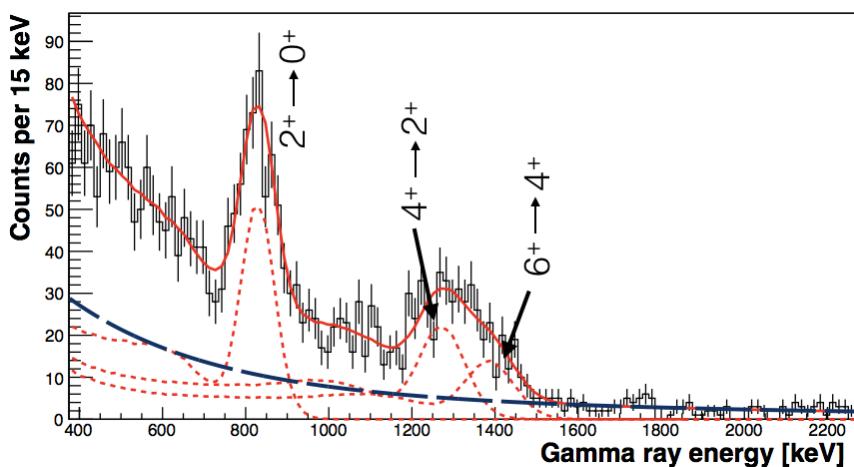
One of the main pillars for understanding nuclear structure is the nuclear shell model. In the shell-model description, nucleons occupy single-particle orbitals under the influence of an average potential created by the interactions among all nucleons. In this picture, the occupation probabilities for the single-particle and single-hole states in the odd neighbors of a good doubly-magic nucleus should be unity. However, the coupling to collective excitations of the core can lead to a fragmentation of the single-particle strengths. In this experiment, which was performed at the Radioactive Isotope Beam Factory (RIBF), operated by the RIKEN Nishina Center and the Center for Nuclear Study of the University of Tokyo, the spectroscopic factors of single-hole states in ^{131}Sn and ^{131}In were measured. Furthermore, the decay of the $0f_{5/2}$ proton-hole state in ^{131}In was observed for the first time. The states of interest were populated in the one-neutron respectively one-proton knockout from a radioactive ^{132}Sn beam at relativistic energies. The experimental results were compared to theoretical calculations based on the relativistic particle-vibration coupling model and to experimental information for single-hole states in the stable doubly-magic nucleus ^{208}Pb . This work was recently published in *Physical Review Letters* (V. Vaquero, A. Jungclaus *et al.*, *PRL* 124, 022501 (2020)).

EXPERIMENT NP1712-RIBF145R1: FIRST SPECTROSCOPY OF EXCITED STATES IN THE $T_z = 2$ NUCLEI $^{56}\text{Zn}_{26}$ AND $^{60}\text{Ge}_{28}$ – ISOSPIN SYMMETRY TOWARDS THE PROTON DRIP-LINE (FPA2017-84756-C4-2-P, PhD student Álvaro Fernández, Andrea Jungclaus)

The invariance of the nuclear interaction under the exchange of protons and neutrons, the isospin symmetry, was considered a well established symmetry in nature since the seminal works of Heisenberg and Wigner.

The study of the so-called Isobaric Analogue States -IAS- in nuclei with the same atomic number, but exchanged number of protons and neutrons, soon revealed that the presence of the electromagnetic interaction alone is not able to explain the experimentally observed differences between the excitation energies of these states. Significant experimental findings have been obtained during the last few decades regarding isospin non-conserving interactions of nuclear origin, and of particular interest is the information on Mirror Energy Differences -MED- gathered in nuclei with valence nucleons occupying the $0f_{7/2}$ shell, that is, nuclei between the doubly magic nuclei ^{40}Ca and ^{56}Ni . The published results raise the question of the fundamental origin of these isospin breaking effects and their persistence towards heavier regions of the nuclear chart.

With the experiment NP1612-RIB145, we are aiming to extend the information on MED towards the proton drip line by studying the $T_z=2$ mirror pair $^{56}\text{Zn}/^{56}\text{Fe}$. The experiment was conducted at the Radioactive Isotope Beam Factory (RIBF), operated by the RIKEN Nishina Center for Accelerator-Based Science and the Center for Nuclear Study of the University of Tokyo (Japan), in April 2019. In this experiment, a ^{57}Zn beam was produced, separated and identified in the BigRIPS spectrometer. Excited states of ^{57}Zn were populated via the one-neutron knockout reaction and the deexciting gamma rays were detected in the DALI2+ NaI array. The data analysis is ongoing and preliminary MED's for the yrast sequence up to the excited 6+ state have been obtained.



Gamma ray spectrum of ^{56}Zn after one-neutron knockout on ^{57}Zn . The solid line represents the fit to simulated DALI2 responses and the individual components of the fit are depicted with dashed lines.

PHYSICAL BEHAVIOR AT NANOSCALES

Molecular hydrogen (H_2) is probably the most obvious current candidate to replace fossil fuels as an environmentally neutral energy vector. The safe and efficient storage of H_2 presents, however, a series of technological challenges not yet solved. One of the possible solutions is the adsorption of H_2 at low temperatures in sufficiently light nanostructured materials. However, practical limitations impose a minimum temperature of 77 K (that of liquid air) and about 50 atmospheres of maximum pressure. This imposes particularly problematic thermodynamic conditions since, above 33 K, molecular hydrogen is supercritical, that is, it is impossible to condense it whatever the pressure. Only by extreme confinement comparable to the molecular size itself, can this thermodynamic restriction be overcome.

During 2019 we have completed an experimental study on the preparation of nanostructured materials by intercalating 1-Propanol in graphite oxide. In particular, we have observed surprisingly high behavioral differences depending on the isotopic composition of 1-Propanol that influence the final structure of the material.

On the other hand, a detailed atomistic numerical study of the formation and stability of Ni-Au nano-particles has been carried out in concomitance with the corresponding experimental studies of preparation and characterization.

GLASSY PHENOMENOLOGY IN CRYSTALS WITH MINIMUM DEGREE OF DISORDER

In this line, we collaborate with the group of Prof. Josep Tamarit of the Universidad Politécnica de Barcelona. The efforts in recent times have focused on the study of crystalline systems which, due to the presence of some kind of disorder, present, at least in part, the same phenomenology exhibited by disordered media in their thermal, mechanical or dielectric properties at low temperature. Such a disorder can be of a static nature, generated for instance by differences in the distribution statistics of a substituent, or of a purely dynamic nature. The purpose of this line of research is that these materials, by presenting a quantifiable type of disorder, make it possible to unequivocally identify the microscopic entities capable of coupling with the acoustic field and generate the phenomena that give rise to the aforementioned anomalies (two levels, "soft" modes, etc.). During 2019 we have succeeded in identifying how these anomalies, in the case of crystals of the CBr_nCl_4 form ($n = 1, 2$), are due to substitutional disorder (exchange of atomic species maintaining the position) between Cl and Br atoms.

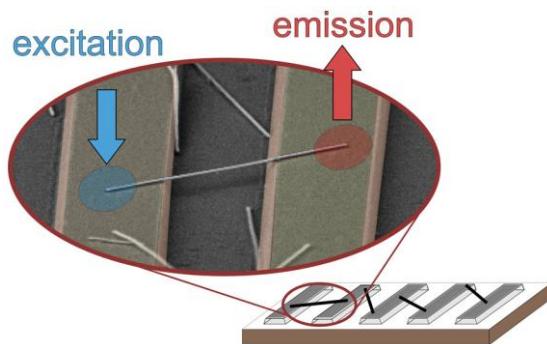
OPTICAL PROPERTIES OF METASURFACES: BOUND STATES IN THE CONTINUUM

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. We have shown that simple metasurface configurations may support robust, 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 (ED) and/or magnetic dipoles (MD). First, a dipole-dimer array has been shown to yield a BIC at normal incidence as the dipole detuning parameter vanishes; this has been experimentally verified through Au-rod dimer metasurface in the THz domain by our colleagues in the Surface Photonics group at the Technical University of Eindhoven. A similar phenomenology has been theoretically predicted for a Si cylinder/disk metasurface supporting overlapping MD/ED resonances. Second, an array of single perpendicular MDs is shown to exhibit a so-called Brewster BIC at normal incidence, which evolves into a quasi-BIC at oblique incidence with a rich phenomenology as the (non-degenerate) MD is tilted. We show that a high-refractive-index disk metasurface in the GHz domain in turn provides clear experimental evidence of such Brewster quasi-BICs, as verified by our collaborator Jean-Michel Geffrin at the Institut Fresnel in Marseille. Our theoretical work has been developed in collaboration with the Donostia International Physics Center, supported in turn by MICIU Excelencia Projects LENSBEAM & MELODIA.

SEMICONDUCTOR NANOWIRE PHOTOLUMINESCENCE

We have continued our research work on Nanowire Photonics, paying attention on their performance as optical cavities coupled with quantum emitters, which has developed as a field of great interest in Nanophotonics, for example, for the highly efficient generation of individual photons or the control of very intense nonlinearities. However, when it takes place in the nanometric cavity size regime, well below the wavelength of the emitted light, the interaction is complicated by non-radiative losses. In our recent work, we have achieved a very efficient decrease in non-radiative (unwanted) recombination for very small waveguide-type cavities using semiconductor nanowires with a core-shell structure. In experiments carried out by our collaborators of the University of Regensburg on photoluminescence of semiconductor

nanowires, the advantages of such nanowires are shown, as a one-dimensional waveguide cavity, which host free excitons that emit light upon decaying. In this experiment, the control of the nanowire diameter allows to increase the half-life of these excitons by 2 orders of magnitude (up to 80 ns). In addition, it should be noted that, for the smallest diameters, this half-life can be manipulated in turn by modifying the dielectric environment of the nanowires (the substrate in particular, see figure). This totally dielectric spatial control of the spontaneous emission of light along the nanowires is explained by the theoretical model and numerical calculations developed in our CSIC group, based on the description of the spontaneous emission as a coupling to the optical modes of the nanowires. This observation opens up fascinating perspectives at the fundamental level to control the light-matter interaction at the nanoscale, with potential applications especially for tunable and active nanophotonic devices: as p. ex. LEDs, solar cells, nanolasers, qubits, nanosensors, etc.



SPECTROSCOPIC TECHNIQUES APPLIED TO THE STUDY OF MATERIALS OF INTEREST IN CULTURAL HERITAGE

Regarding this research line, the collaboration with the Scientific Research Department of the Metropolitan Museum of Art has continued for the study of natural dyes. This time, the red dye alkannin was studied. Its molecular structure is related to naphtazarin. Analysis were carried out by Raman and SERS spectroscopy. Different pH values were used in order to determine the optimal conditions for the SERS detection of this dye. Besides, the vibrational study of the alkannin molecule was carried out with the aim of assign the vibrational normal modes to the bands observed in the Raman and SERS spectra. Firstly, the optimization of the molecule geometry was carried out. Later, the Raman spectrum was calculated. For this task, DFT computational calculations were employed. The B3LYP level of theory and the 6-31+G** basis set were used. With this data the interaction mechanism of the alkannin molecule with the silver nanoparticles was deduced.

In collaboration with Prof. Lombardi from the City College of New York the vibrational analysis of substances of abuse (THC, cannabinol, cannabidiol and HU-210b) whose Raman and SERS characterization was carried out in the department of Chemistry of City College. With the aid of DFT calculations, the Raman and SERS bands were assigned to the vibrational normal modes of each drug. By comparison of the intensity and position of the experimental spectra, the adsorption mechanism of the molecules on silver nanoparticles, used as SERS substrates, were deducted.

SPECTROSCOPIC TECHNIQUES APPLIED TO THE STUDY OF ARTIFICIAL MATERIALS OF HERITAGE

During the year 2019 we have continued working on the possibility of synthesizing AgNPs supported in hydrated calcium silicate. These compounds would be biocompatible and therefore their possible use as drug transport agents will be studied. The variables to study are the concentration of Ag, the temperature and the presence of aluminum in the hydrated calcium silicate. Currently, it has been possible to synthesize hydrated calcium silicate with Ag particles. These compounds have been characterized by different instrumental techniques (SEM / EDX, DRX, FTIR, Micro-Raman) and work on the possibility of using them as sensors.

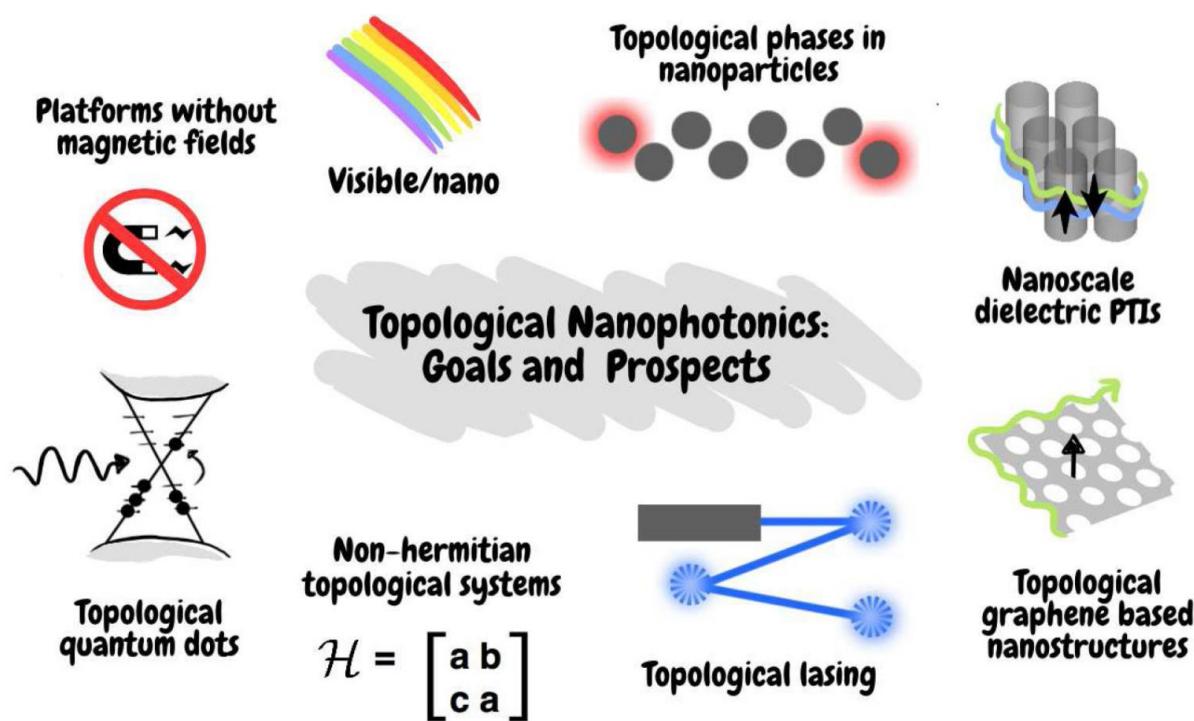
In collaboration with the IETCC, we work on cement synthesis with application in 3D printers. In the synthesis of cements, recycled materials from demolition will be used.

Finally, in collaboration with the Servicio de Criminalística del Instituto Nacional de Toxicología y Ciencias Forenses in Madrid, a research line was started during the 2018 dealing with the study of a methodology of analysis of bones based on the application of spectroscopic techniques, Micro-Raman and Micro-FTIR.

TOPOLOGICAL NANOFOTONICS

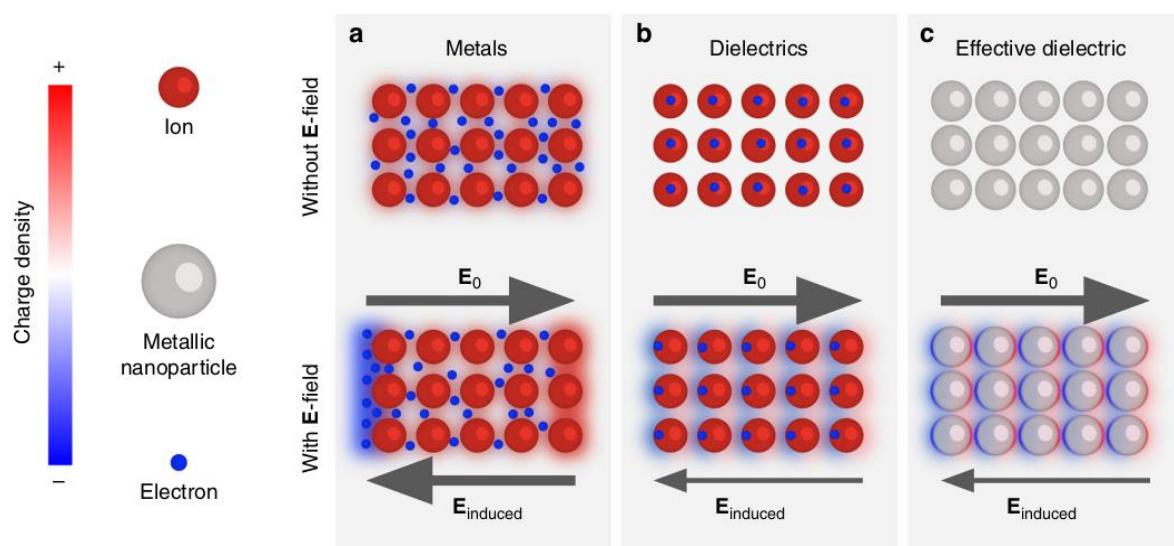
Topological photonic systems, with their ability to host states protected against disorder and perturbation, allow us to do with photons what topological insulators do with electrons. Topological photonics can refer to electronic systems coupled with light or purely photonic setups. By shrinking these systems to the nanoscale, we showed how can harness the enhanced sensitivity observed in nanoscale structures and combine this with the protection of the topological photonic states, allowing us to design photonic local density of states and to push towards one of the ultimate goals of modern science: the precise control of photons at the nanoscale. This is paramount for both nanotechnological applications and fundamental research in light matter problems. For purely photonic systems, we work with bosonic rather than fermionic

states, so the implementation of topology in these systems requires new paradigms. Trying to face these challenges is helping in the creation of the exciting new field of topological nanophotonics, with far-reaching applications.



EXTRAORDINARILY TRANSPARENT COMPACT METALLIC METAMATERIALS

The design of achromatic optical components requires materials with high transparency and low dispersion. We have shown that although metals are highly opaque, densely packed arrays of metallic nanoparticles can be more transparent to infrared radiation than dielectrics such as germanium, even when the arrays are over 75% metal by volume. Such arrays form effective dielectrics that are virtually dispersion-free over ultra-broadband ranges of wavelengths from microns up to millimeters or more. Furthermore, the local refractive indices may be tuned by altering the size, shape, and spacing of the nanoparticles, allowing the design of gradient-index lenses that guide and focus light on the microscale. The electric field is also strongly concentrated in the gaps between the metallic nanoparticles, and the simultaneous focusing and squeezing of the electric field produces strong ‘doubly-enhanced’ hotspots which could boost measurements made using infrared spectroscopy and other non-linear processes over a broad range of frequencies. This allows the design of optical devices to guide or enhance light over an extremely broad range of frequencies, essentially without an upper bound on wavelength.



NANOFABRICATION

The nanofabrication of nanostructures with advanced optical properties was one of the main objectives of our group during 2018. The interaction of appropriated light with plasmonic nanoparticles (NPs) leads to a high intensification of the local electric field, which is the basis for the molecular detection based on Raman and fluorescence. This is why during the past year we have developed methods of synthesis of nanoparticles with interesting applications both in spectroscopy and catalysis. The main purpose of this task was the fabrication of nanoscopic systems with specific morphological properties leading to high electromagnetic field intensifications. The strategy for obtaining these systems has been two-fold: a) The preparation of anisotropic NPs with special morphologies leading to high field enhancement, as nanostars, and b) the association of spherical nanoparticles by using bifunctional molecules leading to interparticle cavities highly effective in enhancing Raman scattering (hot spots). Progress has been also made to develop protocols for the preparation of silver nanostars with tailored morphology, which were not prepared so far in silver. These nanoparticles have a larger number of advantages in relation to gold, since Ag is more efficient in Surface-enhanced Raman scattering (SERS) and Surface-enhanced fluorescence (SEF), because of the greater enhancement factor, and because of their wider range of activity, as the AgNPs exhibit plasmon resonances in the visible spectrum and the near-infrared. The protocols of preparation of Ag nanostars were aimed at avoiding the use of surfactants, which are normally used in the preparation of Au nanostars, since these substances prevent the approach of the analyte to the surface, thus decreasing the efficiency of these systems in spectroscopy.

During the year 2019 the nanofabrication methods of nanostructures were improved, getting more insight on the characterization of the resulting nanoparticles. On the other hand, we have strated the use of new metals, like aluminium, in the fabrication of nanostructured surfaces active in the UV region.

In collaboration with researchers of the Institute of Optics, we are developing fabrication methods of nanostructures, mainly of Ag and Au, through the use of lasers of different nature. Among the methods employed so far we can highlight the followings: a) PLD, pulsed laser deposition, leading to nanostructures containing a high amount of interparticle gaps, and b) Laser Induced Periodic Surface Structures (LIPSS), that lead to nanostructures surfaces of controllable morphology.

SURFACE FUNCTIONALIZATION: FABRICATION OF NANOSENSORS

The functionalization of metal surfaces obtained by self-assembly of organic molecules was a fundamental work line in our group during 2018. The functionalization can highly increase the sensitivity and selectivity of the fabricated nanostructures, resulting in high performance surfaces by combining the physical properties of the obtained metal with the chemical properties of organic molecules self-assembled on them. Moreover, these molecules may increase the biocompatibility of plasmonic metal NPs, which is an issue of great interest in medical applications, and may allow the control of the self-assembly of these systems.

Functionalization experiments derivatives of the cavitands cyclodextrins and cucurbituril were employed to improve the detection ability of these systems. These linkers possess an internal cavity within which molecules difficult to be detected by SERS can be hosted. During the year 2019 we have focused our attention on calixarenes provided by researchers from the University of Chile.

POLLUTANT DETECTION

During the last year, we have carried out the application of the SERS technique in the detection of persistent pollutants that do not need any surface functionalization. These molecules are very important under the environmental point of view, since it is employed in agricultural practices in many countries of the world. Therefore, the detection of these compounds is an important issue to prevent human health risks. This investigation consisted in the adsorption study on the surface through Raman, IR and plasmon resonance, assisted with the vibrational normal modes analysis with DFT of the corresponding metallic complexes.

During 2019 we have applied SERS based sensors fabricated in our laboratory in the detection of bisphenols, highly pollutants molecules employed in the fabrication of polymers.

In collaboration with researchers of the UNESP from Sao Paulo (Brazil) and the University of Bologna (Italy) sensor platforms able to detect the degradation of triazine pesticides were developed.

BIMOLECULE / NANOPARTICLE INTERACTION

The interaction of biological molecules with metal nanoparticles of Ag and Au was studied in depth during the last year. This study was also directed in part to carry out the functionalization of NPs with biomolecules to confer greater biocompatibility and selectivity to the analytical applications of these systems. In order to fulfill this goal, it was conducted a study of interaction of therapeutical peptides such as somatostatine, octreotide, lanreotide and pasereotide with Ag and Au nanoparticles, as well as other interesting peptides like fertiline. This work was done to monitor the structural changes occurring in these peptides once adsorbed onto the surface. In order to get more insight on this interaction, model peptides integrated by three aminoacids were also used.

Moreover, we have developed a methodology of pollutant detection based on the catalytic activity of the enzyme acetylcolinesterase (ACE). This biocatalizer is able to break acethylthiocoline (ACT) giving rise to thiocoline, which is able to interact strobgly with metal surfaces (Au and Ag) being easily detected by SERS. The sensing by this system relies on the fact that polutants act as inhibitors of the catalytical activity of ACE. Regarding this research line, we have also found that Ag nanoparticles are able to degrade ATC.

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

The application of SERS on the study of the Cultural Heritage was centered on the detection of dyes of difficult study by the normal Raman technique. Another important research line was the in-situ fabrication of silver NPs on natural fibers of wool by laser irradiation. This work was carried out in collaboration with the University of Bologna, during the stays of a master student in our department. The employ of this type of metallic substrates is very important for the analysis of artistic pigments and dyes. This is due to the ability to be prepared directly on a specific spot of the material (fibres, in this case) without leaving any mark on it. During the past year we have applied this method to the characterization of monoazo red colorants as well as black polyazo colorants highly employed in textile dying.

The in-situ photoreduction and also the nanoparticle deposition on the fiber allowed the analysis of the colorant cochineal on archaeological fibers coming from the Chilean cultural heritage. The highly sensitive techniques also lead to the detection of biomolecules coming from the cochineal insect.

SERS technique allows developing forensic analysis of archaeological and heritage materials. In this regard, we have developed methodologies to analyse drugs found in biological materials of mummies, such as the hair of persons who consumed these drugs in the past. This work was done in collaboration with researchers of UCLA University at Los Angeles (USA).

Furthermore, during the year 2019 we have started a new research line called Forensic Philology in collaboration with researchers from the Cà Foscari University in Venice (Italy). By means of this line we intend to analyse iron gall inks aimed at obtaining information from ancient manuscripts regarding the localization and interventions on these manuscripts.

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.
- Crystallization in cryogenic micro-jets of molecular liquids.
- 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.
- Cold plasma generation in low pressure gas discharges.
- Mass spectrometry of ions and neutrals with energy resolution.
- Visible and millimetric emission spectroscopy of plasmas.
- Langmuir probes for electron energy and charge density measurements.
- Linear and non-Linear (Stimulated) Raman Spectroscopy.
- Supersonic gas jets.
- Undercooled liquid micro-jets.
- Cryogenics.
- Raman-Raman double resonance spectroscopy.
- Difference frequency laser spectroscopy

RESEARCH ACTIVITY:

MOLECULAR PHYSICS OF AND PLASMAS

Astrophysical ices

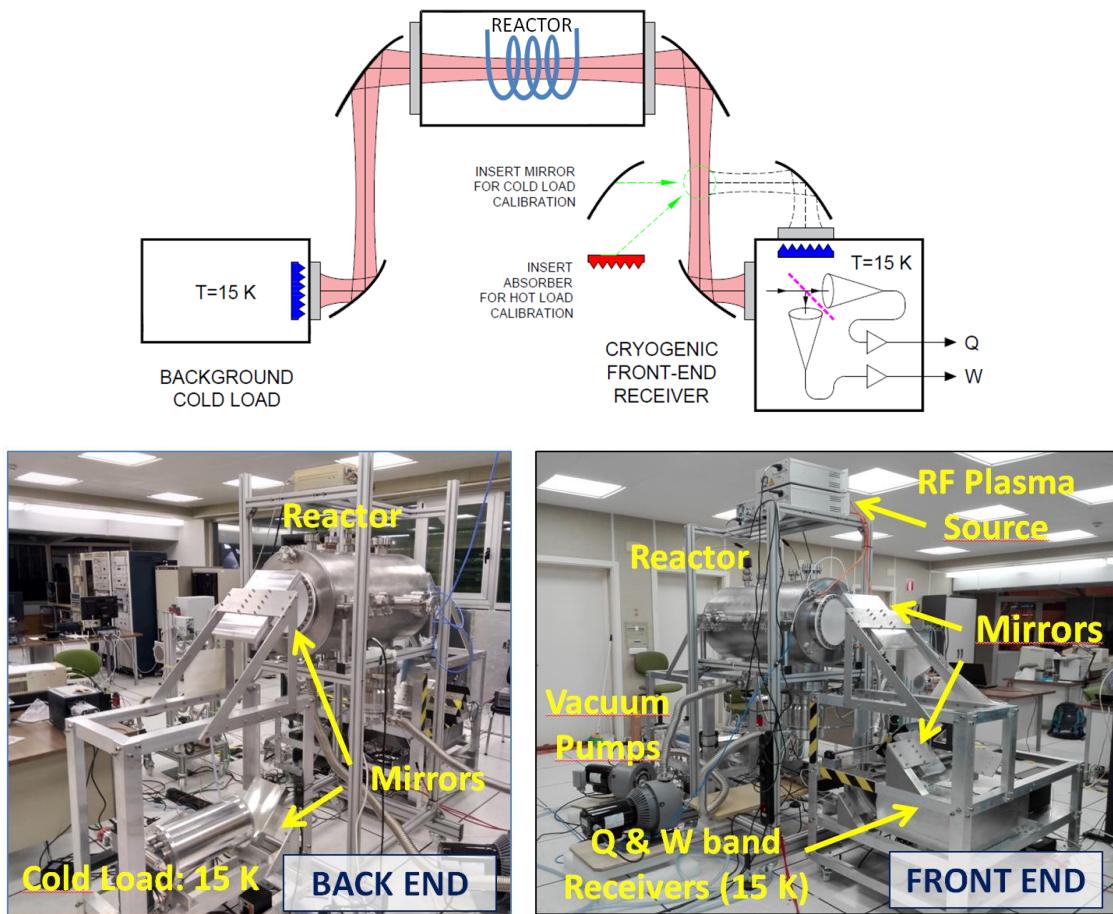
One of our lines of research is devoted to the investigation of ices similar to those found in different astrophysical environments, like the surface of interstellar dust grains, the surface of cold Trans Neptunian objects, or in comet nuclei. During 2019 we have concentrated in the study of the interaction of N₂, CO, CH₄ and CO₂ with hydrogenated amorphous carbon (HAC) surfaces, analogous to those of interstellar dust grains and generated at the IEM Plasmas laboratory. We have employed the new ultra-high vacuum chamber, depositing small doses (below the monolayer regime) of volatiles on the HAC surfaces kept at low temperatures (between 20 and 30 K). Thermal programmed desorption of these coatings was performed, taking advantage of the "line of sight" configuration of the quadrupole mass spectrometer that allows the collection of desorbed molecules coming exclusively from the carbonaceous surface. The distribution of desorption energies of N₂, CO, CH₄ and CO₂ over HAC was obtained. As a main conclusion, a stronger interaction of the volatiles with the aromatic regions than with the aliphatic chains present on HAC surfaces is observed. In this same line of research, a theoretical study on the formation water molecules on a silicate surface has been published this year. The work was performed during the stay of the PhD Germán Molpeceres in the group of Dr. Albert Rimola at the Autonomous University of Barcelona.

On the other hand, a collaboration with Drs. Izaskun Jiménez-Serra and Guillermo Muñoz-Caro at the Centro de Astrobiología, INTA-CSIC, has been initiated to investigate 2-aminooxazole in astrophysical environments. It was predicted that this species is involved in RNA formation, and therefore its detection in the interstellar medium could give important clues about prebiotic chemistry. The objective of this work is to obtain infrared spectra at low temperature of 2-aminooxazole, as well as destruction cross sections by both UV radiation and cosmic rays.

Within the frame of a Unidad Asociada with the Department of Physical Chemistry of the Complutense University, we have concluded a collaboration with Dr. Pedro C. Gómez, which was running for several years, on the theoretical calculation of different molecular systems. In recent times, we worked on the prediction of spectra in the near-IR region of amorphous ices by means of Molecular Dynamics. In particular, we aimed to simulate the spectra of solids made of H₂O and various small molecules, like CO₂, CH₄ and others, such as are found in the so-called Trans Neptunian Objects, including Pluto and Charon, for which some exciting new data become available from the New Horizons mission. This line of work was completed with a new collaboration with Prof. Emilio Artacho, at the Cavendish Laboratory of Cambridge, UK. The results have been published in 2019.

Spectroscopic characterization of cold plasmas of astrophysical relevance

Within the Nanocosmos EU project, the installation and commissioning of a Molecular Astrophysics Laboratory at the Astronomical Observatory of Yebes (Guadalajara, Spain) has been concluded. It will allow the study of rotational emissions of molecules of astrophysical interest by millimetric spectroscopy. The new laboratory is equipped with detectors in the Q (31.5-50 GHz) and W (72-116 GHz) bands and 16 fast Fourier transform spectrometers, providing a resolution of 38 kHz. A reactor has been built, where gases can be introduced at low pressure and afterwards be ionized or dissociated by inductively-coupled radiofrequency discharges that generate new chemical species. These gases can be studied too under neutral conditions. Criostats at 15 K allow minimizing the background radiation and are used for refrigeration of the radio-receivers. The laboratory is fully operative and some papers have been published in 2019 with the excellent initial results or are under preparation.



Reaction dynamics

We have continued the collaboration with F. J. Aoiz and J.E. Verdasco (U. Complutense, within our Unidad Asociada contract) and V. Sáez Rábanos (UPM), on the quantum dynamical study of the reactivity of two prototype systems: O(³P)+H₂ and F+HD at very low temperatures. In the O(³P) + H₂ reaction we have found unexpected dynamical effects that change the lambda doublet propensity in the tunneling region for rotationless reactants. The calculations also show significant variations in the reaction mechanism when going from the deep tunneling regime to hyperthermal energies. In the F+HD ($v=0,1$) reaction, our calculations for rotationless molecules established the presence of shape type orbiting resonances associated to specific values of the total angular momentum for collision energies below 2 meV. The resonance structure was common to the two isotopic exit channels and the resonance peaks were much more intense for the reaction with HD ($v=1$). The observation of these resonances is in principle feasible, but poses still a great experimental challenge.

Infrared spectroscopy of molecular ions of astrophysical relevance.

We have followed up on the study of molecular ions of astrophysical interest. In collaboration with the University of Cologne (S. Schlemmer, O. Asvany and S. Thorwirth), we have measured for the first time in the laboratory, vibration-rotation transitions of C¹⁴N⁺ and C¹⁵N⁺. For that purpose, we have used the technique of “Laser Induced Inhibition of Complex Growth”, using a quantum cascade laser as a narrow-band excitation source. The ions are mass-selected and confined in a cryogenic ion trap at ~ 7 K, therefore, only transitions originating from very low J levels have been observed. The study of transitions involving higher J levels is currently being pursued in a room-temperature hollow-cathode discharge.

Generation, processing and study of interstellar dust analogs

We have continued with the production and characterization of carbonaceous nanoparticles of astrophysical interest in plasmas of Ar/He as buffer gases and C₂H₂ as precursors, generated in a capacitively coupled radiofrequency reactor, which was specifically designed for this purpose. The nanoparticle formation has been tested in-situ by the dispersed light of an expanded laser beam crossing the plasma region, registered with a CCD camera; and by ex-situ infrared spectroscopy, which provides information about its composition. The plasmas have been characterized through optical emission spectroscopy and, fundamentally, by mass spectrometry of neutrals and ions. A kinetic model has been developed to rationalize the experimental results. This study has been already published during 2019.

The study of the formation of amorphous hydrogenated carbon interstellar dust analogs, has been extended with respect to the previous year, using inductively and capacitively coupled RF discharges of He/Ar and CH₄/C₂H₂ mixtures. The diagnostics of these plasmas have been done by optical spectroscopy and mass spectrometry. The samples generated in this way are formed by thin films or dust deposits, according to the type of plasma production. Moreover, in collaboration with the Laboratory of Ices of our department, we have studied the adsorption and desorption of different gases of astrophysical interest from the surfaces of these carbonaceous samples as a function of temperature. These results have been compared with the available bibliographic data on other materials. A simple model has been used for the rationalization of the data and the publication of the results.

Within the European Synergy Project, Nanocosmos, we have continued our collaboration in the spectroscopic characterization of the sputtering plasmas of Stardust Machine. This facility is devoted to the simulation in laboratory of the generation mechanisms of dust nanoparticles, similar to those taking place in the interstellar space. During 2019, the results obtained with graphite targets using pure Ar as buffer gas or adding small H₂ quantities have stressed the largely aliphatic character of the dust produced in this way, nearly without aromatic components; which appear only after a heating process. These results can lead to a revision of the mechanisms proposed till now for circumstellar envelopes.

Within the line of work of characterization of astrophysical systems of different types, we have also focused on the study of phyllosilicates, that is, expansive clays that can be found, not only on Earth but also on other bodies of the Solar System, such as Mars or the dwarf planet Ceres. We carry out both a theoretical study, based on the use of first principles methods, and experimental, with the synthesis of samples and their analysis based on IR spectroscopy. We are studying also the interaction of these clays with aminoacids, and the possible survival of the biological samples adsorbed at their surface, under extremal conditions of UV or thermal irradiation. The minerals most studied in 2018 were smectites and montmorillonites, together with particles ranging from 2 to 50 μm of quartz, feldespat, calcite, iron and aluminum oxides, silicon, gypsum and aragonite, keeping our collaboration with Dr. Ana María Fernández (CIEMAT).

MOLECULAR FLUID DYNAMICS

During 2019 we have continued the quantitative study of out-of-equilibrium gas flows, increasing the temperature range up to 900 K. Supersonic gas jets are an extraordinarily fertile medium in fluid dynamics, where the study of inelastic molecular collisions, 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, developed over the last twenty-five years, whose performance and flexibility are unique worldwide.

We have finished an exhaustive experimental study of the H₂:H₂ inelastic collisions in the 20 to 300 K thermal range. The starting data stem from very accurate measurements of number densities and rotational populations in H₂ supersonic jets, carried out in our laboratory by means of Raman spectroscopy. These experimental data have been analyzed using the formalism of the kinetic Master Equation, derived from the generalized Boltzmann equation for molecular gases. Several sets of rate coefficients for inelastic collisions, calculated theoretically and published in the literature, have been employed to simulate the experimental data. By scaling the best set, a set of optimal scaled-to-experiment rate coefficients has been obtained, which reproduce the more than 50 experimental data of population gradients with a standard deviation <1.4% over the entire thermal range of 20 to 300 K. A thorough analysis of the supersonic flow has been necessary to extrapolate the measurements to the stagnation region within the nozzle. We also show that the problem of thermal non-equilibrium in H₂ does not allow simplifications because the collisional kinetics is highly non-linear, critically depending on the breakdown of the local equilibrium between molecular rotation and translation.

We have also finished the analysis of the inelastic collisions of O₂ with He, based on the measurements in our laboratory of the time evolution of the rotational populations of O₂ mixed with He in 3 supersonic jets. Like in the case of H₂:H₂ collisions above, the experiments were interpreted within the formalism of the kinetic Master Equation, using the rate coefficients for inelastic collisions calculated by the ITERMOL group of the IFM-CSIC. This work allowed validating the theoretically calculated coefficients, and confirmed that the fine structure due to the electron spin of O₂ can be neglected for temperatures greater than 10 K, which greatly simplifies the collisional dynamics.

Regarding instrumental development, we have continued the optimization of a high temperature nozzle, in order to study the vibrational relaxation of molecules such as CO₂, a very important process for the radiative transfer within Earth's atmosphere, as well as those of Venus and Mars. The heating is produced by electrical resistances, reaching nozzle temperatures up to 900 K. The nozzle block is isolated from its holder by means of a water-cooled spacer, to avoid possible damage to the micro-positioners and other sensitive components within the expansion chamber. Nevertheless, it has been necessary to deal with heating problems in the optical elements near the nozzle, which spoiled the imperative stability of the instrument. Once fixed these issues, we have measured the number densities and the rotational and vibrational temperatures in CO₂ jets from nozzles at 800 K and at room temperature, the latter as a reference for its analysis. In these experiments, a large thermal breakdown is observed between the vibration (~ 600 K) and the rotation (~ 200 K), but not so between rotation and the translation.

On the other hand, we have carried out prospective experiments to measure the flow field (temperatures and densities) around an evaporating water meniscus by means of Raman spectroscopy. The evaporation process is well characterized from a macroscopic point of view, but the mechanism at microscopic scale is not known with detail. In this experiment it is crucial to keep a constant droplet size, so a fine controlled injection system has been designed. In the first measurements carried out in air, we have observed a slight cooling of the evaporating H₂O with respect to the ambient temperature.

In the methodological development, we have progressed considerably in our understanding of n-LTE (non-local thermal equilibrium) dynamics and its implication on some gas-dynamic physical quantities. In particular, we have found a general formulation, for the first time to our knowledge, of the heat capacity of a gas under n-LTE conditions based solely on the populations of the molecular energy levels. This paves the way to its direct spectroscopic determination. As an immediate consequence of this new formulation, the adiabatic coefficient $\gamma=C_p/C_v$, widely used in the Navier-Stokes equations, shifts from being a molecular quantity, depending only on temperature (under LTE conditions), to depend strongly on the thermal breakdown between translational and internal degrees of freedom under n-LTE. This explains the usual lack of precision of the Navier-Stokes equations under n-LTE conditions. We have successfully deepened in other quantities like the relaxation times and the bulk viscosity, having been able to reformulate them in compact expressions based on inelastic collision rates, which allows their direct determination from spectroscopic jet experiments. Finally, we have developed an original method to retrieve the translational temperature along a supersonic jets based on the experimental number densities and populations, combined with inelastic collision rates calculated from first principles. This method has been checked in jets of molecular hydrogen with optimal results.

Finally, continuing our collaboration with the Department of Theoretical Chemistry and Physics of the IEM (ML Senent) we have recorded the Raman spectra of methyl-formate (HCOOCH₃), both in static gas phase and in supersonic jet with rare gases, and of its deuterated isotopomer DCOOCH₃ in the gas phase. Methyl-formate is a molecule of great astrophysical interest, present in star-forming regions, and correlated with dimethyl-ether that was analyzed by our group last year. Like in her "sister" molecule, the region of the torsional overtones of methyl-formate is very complex due to their coupling with the skeletal COC bending mode and the presence of many hot bands. This has impaired so far the safe assignment of these modes, crucial to detect these molecules in the interstellar medium.

LASER SPECTROSCOPY

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

Most of the work carried out in the Laser Spectroscopy Laboratory in 2019 has been a continuation of the experiments already initiated in 2018, whose aim was the obtention of experimental parameters for the broadening and shift of the first lines of the rotational Raman spectrum of the monodeuterated hydrogen (HD) molecule in the HD-He collisional system. Our results would then be compared with the values of those same parameters as obtained by others researchers through simulation and computational methods. These experiments also constitute a continuation of a broader line of work already started in 2017, with the study of the D₂-He system, about collisional processes in the isotopologues of hydrogen.

Molecular systems of the H₂(HD, D₂)-He type, consisting of the lightest inert atom and an isotopologue of the lightest stable molecule known, constitute relatively simple collisional pairs. This simplicity is beneficial for several reasons: firstly, they are considered “benchmark” systems for the study of the processes of collisional energy transfer, since they allow the observation of such processes without the layer of complexity added by collisional partners that are heavier, more reactive or have more degrees of freedom (for example, molecules instead of atoms). Secondly, and precisely because of this lesser complexity, the computational cost of calculations and simulations on these systems is much lower. This allows the realization of much faster advances in both calculation methods and potential energy surfaces, that can be incrementally improved through the comparison with experimental results.

The experiments carried out in our laboratory in 2018 in this collisional system already bore initial fruit in the form of experimental values for the broadening and shift coefficients for the first lines of the rotational Raman spectrum of HD at different temperatures (77, 195 and 298 K). At the beginning of 2019 we carried out a comparison of our results with those obtained by researchers from other international groups specializing in the simulation of collisional processes and which whom we collaborate regularly, namely professors F. Thibault (University of Rennes) and P. Wcislo (University of Torun). From this initial comparison it became apparent that additional measurements were needed at different pressures and with different relative concentrations of the active molecule (HD) and its collisional partner (He) in order to have a more complete data set. Finally, and after this new round of measurements was carried out in the first half of 2019, we were able to present a satisfactory comparison between the experimental and calculated values of the broadening and shift coefficients at the three temperatures of reference. Some of these results are presented in the attached figure. This comparison, together with all the associated experimental and calculated results, have been recently accepted for publication in the journal *Molecular Astrophysics*.

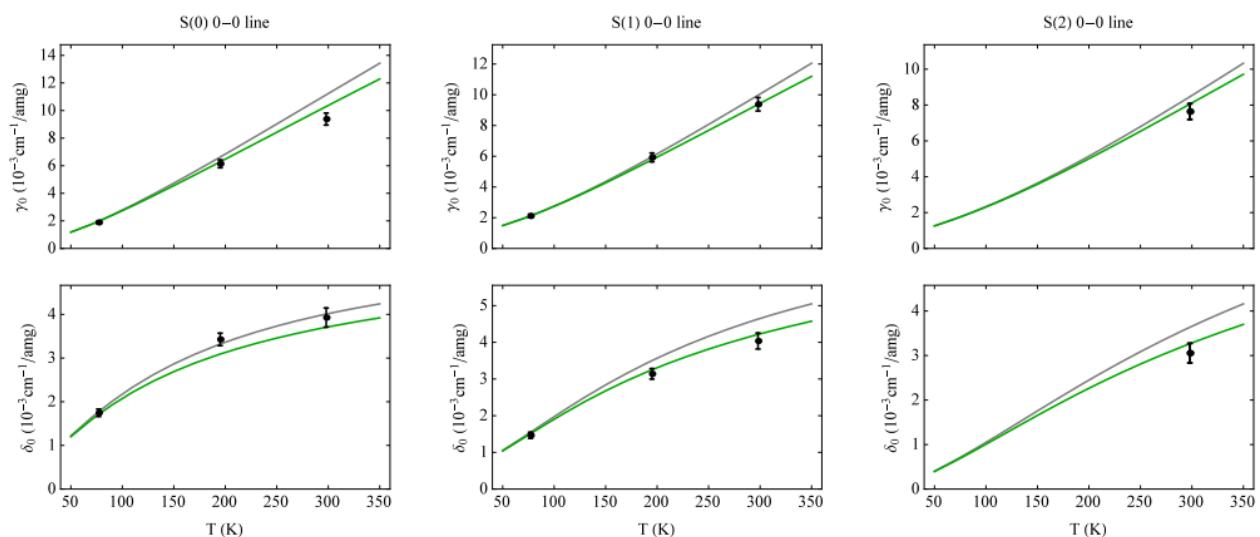


Figure 2: Comparison between the broadening (γ_0) and shift (δ_0) coefficients obtained experimentally (dots) and by simulation (line) for the S(0), S(1) and S(2) lines of the pure rotational Raman spectrum of HD perturbed by He and their variation with temperature.

Once the HD-He measurements were finished, we started the preparation of the next experiment, a new collisional/lineshape study in the CO-N₂ system. This included measurements of the rovibrational Raman spectrum of CO at different pressures, temperatures and relative concentrations of CO/N₂, as well as measurements of the rate of diffusion of the molecules in these mixtures in order to determine the optimal conditions for the experiments, which are expected to be carried out in the first half of 2020.

THEORETICAL MOLECULAR PHYSICS OF AND PLASMAS

Atomistic modelling and experimental characterization of secondary uranium oxide phases produced in conditions of storage of spent nuclear fuel

Within the framework of a Joint Contract between IEM and CIEMAT dedicated to the “Experimental and Theoretical Characterization of secondary phases and uranium oxide”, we have carried out a joint research on uranium oxides such as schoepite, metaschoepite, beckerelite and urafonane. The crystal structure and IR and Raman spectra of these materials have been measured at the Unidad de Residuos Radiactivos de Alta Actividad (URRAA) of CIEMAT, and at IEM we have concentrated on the atomistic modelling of such periodic solids using DFT, plane wave basis sets and pseudo-potentials, which allows us estimating the theoretical counterpart of the magnitudes measured at CIEMAT. Furthermore, the theoretical treatment affords the calculation of mechanical properties of these materials.

Quantum Control of Alignment and Orientation in Isolated Molecules and Ultracold Dipolar Gases

The quantum no-cloning theorem establishes that an arbitrary unknown quantum state cannot be copied. This important theorem for the field of Quantum Information Theory, was apparently discovered in 1982 by Wootters and Zurek, and independently by Dieks. However, Park had published a complete and correct demonstration in 1970. We had presented in a publication an analysis of the historical context in which the better-known versions of the theorem were discovered. We have speculated about the reasons why Park’s demonstration was largely ignored.

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:

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

EMPLOYED TECHNIQUES:

- Scattering and diffraction of X-rays at Wide (WAXS), Small (SAXS), and Ultra-Small (USAXS) Angles and with grazing incident (GISAXS) including micro- and nano-beam with synchrotron radiation.
- Scanning Differential Calorimetry.
- Incoherent quasielastic neutron scattering.
- Optical microscopy. Scanning electronic microscopy.
- Raman Spectroscopy.
- Nanoindentation.
- Neutron Scattering.
- Broad band dielectric spectroscopy.
- Shear rheometry in continuous dynamic torsion, capillary extrusion and elongational rheometry.
- Dynamic mechanical analysis under flexural deformation.
- Dynamic mechanical analysis under tensile deformation: elastic modulus.
- Analysis by crystallization temperature fractionation (CRYSTAF).
- Scanning/transmission electron (STEM) and atomic force (AFM) microscopies.
- 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).
- Simulations using high performance computing.
- Raman Spectroscopy.

- Neutron Scattering.
- Atomic force (AFM) microscopies.
- 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 NANOSTRUCTURE AND MECHANICAL PROPERTIES OF POLYMER SYSTEMS (NANOPOL)

CREEP ANALYSIS OF SOFT POLYMERS BY FLAT PUNCH INDENTATION

Nanoindentation, or depth-sensing indentation (DSI) has become nowadays a fundamental tool for mechanical characterization of materials of diverse nature. Those displaying compliant time-dependent properties represent a special case in which the limitations of the nanoindentation technique arise. In this case, obtaining meaningful and reliable mechanical data represents a challenge by itself. In collaboration with the group of Prof. M. A. Gómez-Fatou (ICTP-CSIC), the mechanical behaviour of a series of compliant poly(styrene-b-ethylene-co-butylene-b-styrene) (SEBS)/graphene nanocomposites was approached by DSI using a cylindrical punch. The nanocomposites contain small amounts of graphene, modified with PE or PS brushes to enhance the interaction with the matrix, and are known to exhibit electromechanical properties. The aim of the work is twofold. On the one hand, the nanocomposites served as a model to test a number of methodologies developed for analysis of viscoelastic and/or viscoplastic behaviour by DSI. On the other hand, the influence of graphene content and type on the time-dependent mechanical properties was investigated.

Creep, understood as a general visco-elastic-plastic behaviour under constant stress, was analysed using a number of strategies. It was found that the cylindrical geometry of the indenter allows defining a range of applied loads in which the conditions of linear viscoelasticity are met. Beyond this limit, viscoplastic flow appears, at a higher pace than linear viscoelasticity. The incorporation of graphene substantially reduces the creep rate most especially under viscoplastic flow. It was also found that the nature of the polymer branch influences the capacity to flow and PE brushes are more efficient than PS ones under linear viscoelastic regime. Finally, comparison of the modulus values obtained by DSI analysis and those from macroscopic data show a good agreement with each other. Consistent values are found and the work offers a route to analyze mechanical data for soft materials.

MORPHOLOGY OF ELECTROSPUN POLY(HYDROXYBUTYRATE) SCAFFOLDS

Poly(hydroxybutyrate) (PHB) exhibits biodegradable and biocompatible properties that can find niche of applications in the biomedical field. However, the mechanical properties deteriorate during shelf storage. In collaboration with Dr. Romo-Uribe (R&D Johnson & Johnson Vision Care Inc., Jacksonville, USA), we prepared PHB scaffolds by electrospinning and stored them at room temperature for 11 months. The aim of the work was to study the influence of the conditions of processing on the morphology and structure that in turn, control the wettability and the mechanical stability upon storage. It was found that the conditions of electrospinning determined whether homogeneous fibrous scaffolds or filaments with aggregates were found. Scanning electron microscopy studies revealed that the homogenous scaffolds consisted of smooth cylindrical microfilaments while the one with aggregates exhibited significant porosity. Such different morphologies were found to influence the wetting behaviour and the variation of the degree of crystallinity with ageing time. It was found that the level of crystallinity within homogeneous scaffolds increased with ageing time and this was associated to secondary crystallization. For the aggregate case, crystallinity remained constant upon storage. The work offers a route to correlate electrospinning conditions with morphology and hydrophilicity, which in turn can be related to structural stability upon ageing. Such correlations should be of great help for the design of biomimetic scaffolds.

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

CONFINEMENT EFFECTS IN NANOWIRES OF POLYMER SEMICONDUCTORS AND THEIR PHOTOVOLTAIC BLENDS

The strong changes induced, by confinement, in the microstructure of the semiconductor poly(2,5-bis(3-hexadecylthiophen-2-yl)thieno[3,2-b]thiophene) (PBTTT) and its photovoltaic blend with [6,6]-Phenyl-C₇₁-butyric acid methyl ester (PC₇₁BM) have been investigated. These organic compounds can be used as model systems to illustrate how sensitive this class of materials can be to spatial confinement on device-relevant length scales. The spatial confinement of nanofilaments as a function of diameter, from 180 to 25 nm, has been investigated by X-ray scattering with nanofocused synchrotron beams. The effects of spatial confinement are evident by crystallization in different crystal forms, reduction of crystallinity, phase segregation and anisotropic crystal orientation. It is also shown that confinement is an efficient tool to direct the overall texture included the crystal orientation of the homopolymer PBTTT and the PBTTT/PC₇₁BM blend in a controlled manner.

STRUCTURE AND PROPERTIES RELATIONSHIP IN BIODEGRADABLE POLYMERS FOR A CIRCULAR ECONOMY

Among the various factors that contribute to the transition from a linear to a circular economy, the identification of superpolymers with outstanding mechanical as well as barrier properties and zero environmental impact has become a mandatory issue. Such new supermaterials render recycling a concrete option for the efficient and ecofriendly management of plastic wastes. The 100% biobased polyester poly(pentamethylene furanoate) has been investigated. At first, a molecular and thermal characterization of the polymer has been conducted and then processed to prepare a compression molded film, despite its amorphous and rubbery nature at room temperature. The mechanical response was typical of elastomers, with a low elastic modulus and stress at break and high elongation at break. An instant shape recovery after breaking was observed, indicating the presence of net points. The barrier properties to O₂ and CO₂ were exceptional. All of these unexpected and surprising properties were explained as being due to the presence of a 2D microstructure characterized by partially ordered furanic rings favored by intermolecular C—H···O bonds.

MORPHOLOGY AND FERROELECTRIC PROPERTIES OF SEMICONDUCTOR / FERROELECTRIC POLYMER BILAYERS

Organic materials are at the center of new electronic applications with characteristics that are not possible from inorganic materials, such as flexibility, lightness or low cost. Organic electronics also have a great advantage when it comes to processability at low temperatures and from solution. This makes possible to coat any type of surface with these functional organic materials and thus providing them with electronic properties. In this sense, the synergy between functional polymer systems with semiconductor and ferroelectric properties has been studied. By means of the spin-coating technique, bilayers of ferroelectric polymers based on poly (vinylidene-trifluoroethylene fluoride), P(VDF-TrFE) have been prepared on poly (3-hexyl thiophene) semiconductor substrates. A study on the polarization of this ferroelectric / semiconductor bilayer has been carried out, and the role of the thickness of the semiconductor has been addressed. Structural and morphological details were investigated by a combination of wide angle X-ray scattering and contact angle measurements. The results obtained show that the presence of a semiconductor polymer layer between a silicon substrate and the ferroelectric polymer layer stabilizes the polarization induced by an external field. We have also observed a decrease in the voltage necessary to obtain a flip in the polarization of the ferroelectric polymer when there is a semiconductor polymer layer between it and the electrode. This constitutes an advantage when including these systems in portable electronic applications.

DEVELOPMENT OF THE POLYMER STRUCTURE DURING A 3D PRINT

In collaboration with the company FAB control, the development of the microstructure in objects manufactured using 3D printing has been studied. The experimental work has been performed using small and wide angle X-ray scattering simultaneously during printing the piece, using synchrotron light. As a model material, isotactic polypropylene (iPP) was used, which is a basic polymer with great potential as a raw material for additive manufacturing. The study was carried out using a custom-designed 3D printer to be used in the synchrotron light line and perform the in-situ X-ray scattering experiments during printing. The results obtained reveal that there is a variation of the crystallinity in the different zones of the deposited layers, reflecting the importance of the interfaces or welding zones. Larger crystallinity was also observed near the corners of the manufactured parts, attributing this effect to a deceleration of the print head.

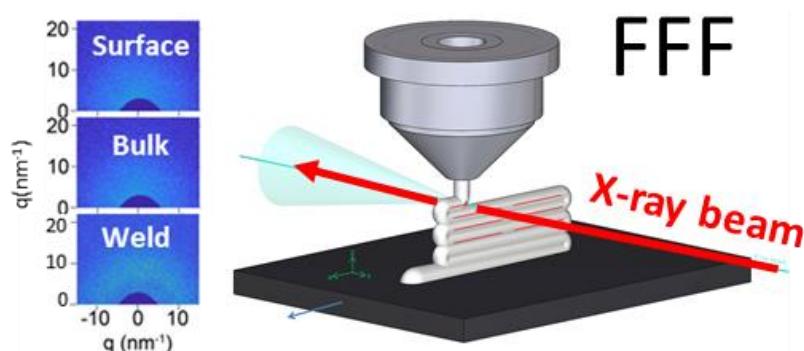


Fig. 1 Scheme of the set-up implemented at the NCD beamline of the ALBA Synchrotron (Cerdanyola del Vallès, Barcelona (Spain)) for the research of polymer materials processed by Additive Manufacturing (3D Printing). Left panel: "In situ" Wide Angle X-ray patterns at significant positions of the manufactured sample.

BIOCOPOLYMERS AND BIOMATERIALS BASED ON AROMATIC AND ALIPHATIC POLYESTERS

The decrease in resources from fossil fuels, the increase in the price of oil, the emission of greenhouse gases in standard methods of production of plastics, as well as the limited biodegradability of these materials, is driving the development of what are known as "biopolymers" or "bioplastics". These are polymers derived from renewable natural resources or biodegradable polymers. In this sense, two polymers deserve special attention: the polylactic acid (PLA), an aliphatic polyester, biodegradable, which can be obtained from natural resources, and the polycaprolactone (PCL) an aliphatic polyester, biodegradable, that is receiving a great deal of attention for use as an implantable biomaterial. In general, biopolymers have thermal, mechanical and barrier properties to gases or water vapor lower than synthetic polymers what limits their use. An alternative to obviate these disadvantages is the preparation of aromatic-aliphatic copolymers. In this sense, copolymers based on polybutylene terephthalate (PBT), polytrimethylene terephthalate (PTT), polylactic acid and polycaprolactone have been synthesized and their properties studied. Likewise, the preparation of biocomposites obtained by incorporation to these copolymers of a series of additives, fundamentally allotropes of carbon, is being carried out.

Group of BIOPHYSICS OF MACROMOLECULAR SYSTEMS

SYNTHESIS, STRUCTURE AND PROPERTIES RELATIONSHIP IN BIODEGRADABLE POLYMERS FOR A CIRCULAR ECONOMY

Polyethylene terephthalate (PET) is a nonbiodegradable polymer whose hydrolytic degradation can take decades. The two following lines of research intend to find routes to incorporate the use of PET to a circular economy.

Self-Assembly of PET-mb-poly(oxyhexane) Copolymers into Double Crystalline Superstructures

In general, double crystalline multiblock copolymers exhibit two well-defined melting temperatures associated with the two phases formed by their constituent blocks.

In this study it is found that all compositions exhibited double crystallinity, but the crystallization of the copolymers was strongly affected by the PET/poly(oxyhexane) composition. When the material is cooled from the melt, the PET phase crystallizes first forming superstructural (micrometer size spherulites) templates. Upon further cooling, the crystallization of poly(oxyhexane) lamellae occurs, within the interlamellar regions of PET spherulitic templates. Polarized light optical microscopy/atomic force microscopy studies were performed and demonstrated the presence of microspherulitic morphology in the whole composition range. Considering all results, including temperature-dependent synchrotron SAXS/wide-angle X-ray scattering, we demonstrate the ability of poly(oxyhexane) to crystallize upon cooling within the previously formed PET spherulitic templates.

Effect of Poly(L-lactic acid) on the Crystallization and Morphology PET-ran-PLA Random Copolymers

In this study PET is combined with poly(lactic acid) (PLA), a well-known biodegradable polymer, and the effect of PLA content in the crystallization of the PET component is investigated. To make the process sustainable, PET was polymerized using monomers that can be derived from PET chemical recycling. Wide-angle and small-angle X-ray scattering (WAXS and SAXS) demonstrated that PLA units interrupt the average crystallizable PET sequences, decreasing its lamellar thickness, melting point, and crystallinity. The copolymers exhibited a microspherulitic PET morphology that changed to axialitic at relatively high contents of PLA. If we consider the degradability of the copolymers obtained together with the green synthetic route, the copolymers produced represent a step toward revalorization of PET recycled monomers for the production of sustainable materials.

Properties of polymers with novel macromolecular architecture

Glycidyl methacrylate (GMA) is a monomer that is of great interest from both a basic and industrial point of view that contains two functional groups, an acrylate and an oxirane. This type of monomers is very valuable as a precursor of polymers and copolymers in advanced applications. These include the synthesis of biodegradable copolymers and the development of drug carriers, (therapeutic) genes or diagnostic agents, biosensors and stabilizers and enzyme immobilizers. In our collaboration with the Department of Organic and Inorganic Chemistry of Alcalá de Henares University, we investigate an interesting approach that allows the controlled polymerization of the two functional groups present GMA to originate macromolecular architectures with interesting properties. The material obtained shows very suggestive properties, such as the total absence of crystallinity and a low value of the glass transition. On the other hand, the macromolecules studied in solution by light scattering have about 10 nm of hydrodynamic radius. These results, combined with those obtained by atomic force microscopy, show that, although macromolecules are spherical in solution, they have a flattened morphology when deposited in glass. Taking into account the wide use of GMA derivatives as carriers in biological applications, the possibility of preparing units with a controlled structure and morphology that can also be functionalized opens an interesting perspective in this research.

Influence of the halogen donor on the halogen bond nature with potential organometallics catalysts

Halogen Bonding is a type of interaction that it is awakening an increasing interest due to their implications in areas ranging from Crystal Engineering to Molecular Recognition or Catalysis. One interesting aspect of these interaction is to elucidate the real nature of the different components of the forces present in the interaction. Certainly, to have closer vision of the nature of the interaction may lead to a higher level of control when using it to tailor properties and reactivities. In collaboration with Alcala researchers, we have performed theoretical calculations and analysis which not only agree with all experimental observations, but also allow ones to understand the nature of the halogen bond as a function of the involved molecules. In particular, the results shown that the nature of the X···I interactions in $[\text{Ru}(\text{CNR})_4(\text{X})_2]\cdot\text{I}_2$ have a higher degree of covalency than $[\text{Ru}(\text{CNR})_4\text{X}_2]\cdot\text{IC}_6\text{F}_4\text{I}$, where the nature of bond seems to be purely electrostatic. Hence the nature of the energy balance involved in the interaction can be tuned by the rational choice of the halogen bond donor and although the covalent component is much smaller than the electrostatic one, it may have a significant effect in the reactivity of the species formed. The results will be published soon.

RESEARCH IN BIOMACROMOLECULES

Study of HER2-Trastuzumab interaction

Trastuzumab is a monoclonal antibody successfully used as a forefront therapy in aggressive tumors overexpressing HER2 receptors. In our lab, we have explored the association of the monoclonal antibody with the extracellular domain of the HER2 receptor where the putative epitope is located. Using a combination of hydrodynamic and electrophoretic experimental techniques and multiscale simulation protocols we were able to describe the structure and the dynamic behavior of HER2-Trastuzumab complexes in water solution at physiological conditions. The high affinity of the antibody-antigen proteins has been proven to be perfectly compatible with the high flexibility found for those complexes.

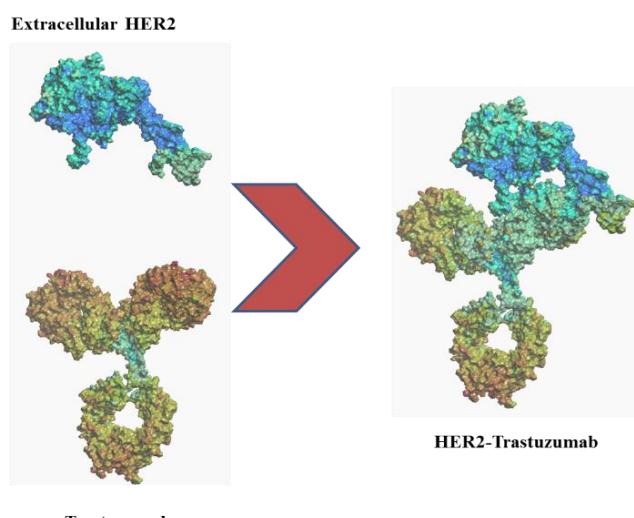


Fig. 2 Illustration of the interaction between HER2 and Trastuzumab and the complex formed

Eukaryotic biofilms of extreme environments

Río Tinto is an extreme acidophilic environment in which it is possible to find a great wealth of eukaryotic organisms. Most of these communities are organized in the form of biofilms along their bed. What characterizes these communities is their photosynthetic metabolism. A fundamental function of biofilms is the protection of these organisms in the extreme stress conditions to which they are subjected. These biofilms are complex and structured, and are mainly formed by polysaccharides. This makes a study of the relationship between structure and properties, such as rheological response, of great interest to understand the ecology of these systems. In this regard, a collaboration has been initiated with the CSIC-INTA Astrobiology Center for the study of the rheological properties of photosynthetic eukaryotic biofilms of the extreme acid waters of Río Tinto. Research is also being done on the characterization of the physicochemical properties of the extracellular polymeric substances that form these biofilms.

Capítulo 3

PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN

Chapter 3

RESEARCH PROJECTS

3.1 DEPARTAMENTO DE QUÍMICA Y FÍSICA TEÓRICAS THEORETICAL PHYSICS AND CHEMISTRY

Desarrollo de nuevos modelos exactamente solubles para sistemas cuánticos mesoscópicos.

Code or Reference: COOPB-20289.

Funding Institution: CSIC

Main Researcher: Jorge Dukelsky Bercovich.

Duration: January 2018-December 2019.

Objectives: Development of exactly solvable models for the study of the static and dynamic properties of mesoscopic systems. The project will stimulate the exchange of students and the cooperations between groups of the CSIC, Universidad Nacional Autónoma de México y Universidad Veracruzana.

Métodos de pocos y muchos cuerpos aplicados al Más allá de campo medio y solucionar exactas en sistemas cuánticos de muchos cuerpos.

Code or Reference: FIS2015-63770-P

Funding Institution: Ministerio de Economía y Competitividad

Main Researcher: Jorge Dukelsky y Rafael Alejandro Molina Fernández.

Duration: January 2016-December 2019.

Objectives: Advanced numerical and analytical methods for the study of quantum many-body systems.

Estudio de núcleos exóticos.

Code or Reference: PGC2018-093636-B-I00

Funding Institution: Ministerio de Ciencia e Innovación

Main Researcher: Pedro Sarriugure y Eduardo Garrido.

Duration: January 2019-December 2022.

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

Campos cuánticos y gravitación: simetría cuántica, mecánica estadística y combinatoria.

Code or Reference: FIS2017-84440-C2-2-P.

Funding Institution: MINECO.

Main Researcher: Eduardo Jesús Sánchez Villaseñor and Jesús Salas Martínez (participation of Fernando Barbero and Juan Margalef).

Duration: January 2018-December 2020.

Objectives: Research in Gravity, Quantum Field Theory, symmetries, gauge theories, black hole physics and statistical mechanics.

Universo y Vacío Cuánticos: Gravedades Multiescala, Cosmología Cuántica de Lazos y Agujeros Negros.

Code or Reference: FIS2017-86497-C2-2-P.

Funding Institution: MICINN.

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

Duration: January 2018-December 2020.

Objectives: The precision era that we live in cosmology, together with the possibilities offered by gravitational wave detection to test General Relativity in systems with strong gravity, have opened new roads to falsify alternatives to Einstein's theory for the formation, evolution, and global behavior of the Universe. Among the possible discrepancies are those that could be originated by quantum effects in the geometry. This project aims to investigate such discrepancies for Quantum Loop Gravity, Multifractional Gravity, and Non-local Gravity.

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

Code or Reference: FIS2016-76418-P.

Funding Institution: MINECO.

Main Researcher: María Luisa Senent Diez.

Duration: January 2017-December 2020.

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

Anion CosChem Exploring the Chemistry and Spectroscopy of Cosmic Anions.

Code or Reference: Anion Cos Chem ANR-14-CE33-0013.

Funding Institution: Agence National de la Recherche ANR (France).

Main Researcher: Ludovic Biennier (Institut de Physique, Université de Rennes)/Participation: M.L. Senent.

Duration: 2014-2019.

Acción COST Molecules in Motion, MOLIM.*Code or Reference:* CM1405.*Funding Institution:* COST, UE.*Main Researcher:* A.G. Csázàr (U. Eotvos, Budapest, Hungary).*Management committee (Spain):* M.L. Senent, M.P. de Lara.*Duration:* 2015-2019.**Theoretical study of the spectroscopy and reactivity of neutral organic species and organic radicals of astrophysical and atmospheric interest.***Code or Reference:* COOPB20364.*Funding Institution:* CSIC*Main Researcher:* María Luisa Senent Diez.*Duration:* 2018-2019.**Dinámica, topología e integrabilidad en sistemas cuánticos de muchos cuerpos***Code or Reference:* PGC2018-094180-B-I00*Funding Institution:* Ministerio de Ciencia e Innovación*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/TCS-43-42*Funding Institution:* Comunidad Autónoma 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.

3.2 DEPARTAMENTO DE ESPECTROSCOPÍA NUCLEAR, VIBACIONAL Y DE MEDIOS DESORDENADOS

NUCLEAR, VIBRATIONAL AND DISORDERED MEDIA SPECTROSCOPY

HIFI, Un espectrómetro para el estudio de reacciones nucleares en HIE-ISOLDE.*Code or Reference:* FPA2017-87568-P*Funding Institution:* AEI*Main Researcher:* María José García Borge*Duration:* January 2018 - December 2020*Objectives:* The main objective of this project is to provide HIE-ISOLDE with a spectrometer for nuclear reaction studies. The existence of the spectrometer will open the field of transfer reactions to the inclusion of those with neutrons in the outer channel as well as other transfer reaction in inverse kinematics. A spectrometer is mandatory to do deep inelastic reactions of great interest for spectroscopy studies of neutron-rich nuclei near ^{78}Ni and for fusion-evaporation reactions possible with the intensity upgrade of ISOLDE. My second objective is to boost the reaction studies in the Nuclear physics line of CMAM. The (p,α) reactions of astrophysical interest will be the first step in particular the $^{19}\text{F}(\text{p},\alpha)^{16}\text{O}$. Third objective is the proactive participation in the local organization of the EMIS Conference at CERN that I promoted and that it will take place from 16th to 21st of September 2018.**Combined plasmonic and microfluidic technology for enhanced pesticide detection.***Code or Reference:* COOPB20373*Funding Institution:* CSIC.*Main Researcher:* Santiago Sánchez Cortés.*Duration:* January 2019-December 2020.*Objectives:* Detection of pollutants by a combination of a Surface-enhanced Raman scattering effect and a flux control mediated by a microfluidic device in suspension.

Nanosistemas basados en efectos plasmónicos orientados hacia detección molecular avanzada, Bodiagnóstico y Teranostica.

Code or Reference: FIS2017-84318-R

Funding Institution: Ministerio de Economía y Competitividad.

Main Researcher: Santiago Sánchez Cortés.

Duration: January 2018-December 2020.

Objectives: Fabrication, characterization and functionalization of metal plasmon nanoparticles with advanced technologies to be applied in the molecular detection of drugs, biomolecules and materials with interest in the Cultural Heritage.

Estudios Experimentales de la Estructura Nuclear Exótica.

Code or Reference: FPA2015-64969-P

Funding Institution: Ministerio de Economía y Competitividad

Main Researcher: Olof Tengblad

Duration: January 2016-December 2019

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.

European Nuclear Science and Application Research 2.

Code or Reference: 654002

Funding Institution: Comisión Europea

Main Researcher: Olof Tengblad

Duration: March 2016-September 2020

Objectives: PASPAG aims for Simultaneous detection of Gamma and Particle Radiation by the use of new scintillator materials combined with the phoswich technique. The JRA aims for cost effective, reduced systems in size and complexity that can be used at several of the European facilities for nuclear structure research.

Protontherapy and nuclear techniques for oncology.

Code or Reference: B2017/BMD-3888

Funding Institution: Comunidad de Madrid

Main Researcher: Enrique Nácher González

Duration: January 2018-December 2021

Objectives: Development of detectors for dose verification

Modelizaciones ab-initio multi-escala: fluidos cuánticos y procesos moleculares a la nanoscala.

Code or Reference: MAT2016-75354-P

Funding Institution: Ministerio de Economía y Competitividad

Main Researchers: Carlos Cabrillo García and María Pilar de Lara Castells

Duration: January 2017-December 2020

Objectives: Study from first principles of processes and materials relevant for nanoscience.

Estudios experimentales y teóricos de la estructura de núcleos exóticos.

Code or Reference: FPA2017-84756-C4-2-P

Funding Institution: Ministerio de Economía y Competitividad

Main Researchers: Andrea Jungclaus, J. Luis Egido

Duration: January 2018-December 2020

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.

Haces Estructurados de Luz y Electrones: Efectos Mecánicos y Magnetoeléctricos en Materia (LENSBEAM).

Code or Reference: FIS2015-69295-C3-2-P

Funding Institution: Ministerio de Economía y Competitividad

Main Researcher: José A. Sánchez Gil

Duration: January 2016-December 2019

Objectives: To investigate theoretically the electromagnetic properties of complex plasmonic, semiconducting and multiferroic nanostructures, with special emphasis on the fundamental aspects of a variety of light-matter interaction properties, in connection with the behaviour of metal/dielectric nanostructures as resonant optical antennas in absorption and emission.

Óptica de Luz Magneto-Eléctrica en Medios Nanoestructurados Dieléctricos (MELODIA).*Code or Reference:* PGC2018-095777-B-C21.*Funding Institution:* Ministerio de Ciencia, Innovación y Universidades.*Main Researchers:* Vincenzo Giannini y José A. Sánchez Gil.*Coordinator:* José A. Sánchez Gil.*Duration:* January 2019-December 2021.

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.

Topological Nanophotonics (NANOTOPO).*Code or Reference:* EXPLORA: FIS2017-91413-EXP*Funding Institution:* Ministerio de Economía y Competitividad*Main Researcher:* Vincenzo Giannini*Duration:* November 2018-October 2020

Objectives: NANO-TOPO is an ambitious project that will make use of “topology” in some important aspects of nanophotonics in order to obtain new phenomena at the nanoscale. More in detail, with this proposal we want to study 1D and 2D plasmonic topological insulators that feature hotspots with remarkable resistance to disorder.

Tecnologías en Ciencias del Patrimonio.*Code or Reference:* P2018/NMT-4372*Funding Institution:* CAM.*Main Researcher:* Rafael Fort*Duration:* January 2019-December 2021.

Objectives: Investigate the conservation of cultural heritage with a scientific and technological perspective, oriented towards the transfer of results to the involved sectors, industry, citizenship and heritage conservation agents, favoring the tourism industry.

Innovative circular ultralightweight cement mortar containing inorganic recycled building materials for the manufacturing of topologically optimized 3D printing architectural products.**(CUCEM3D).***Code or Reference:* RTI2018-097074-B-C21*Funding Institution:* MINECO.*Main Researcher:* Moisés Frías Rojas.*Duration:* January 2019-December 2021.

Objectives: To set the scientific & technological basis for the synthesis and performance study of novel eco-hybrid cement-based mortar formulations containing inorganic recycled building materials and circular lightweight aggregates for the manufacturing of topological optimized 3D printable architectural elements.

Programa Ramón y Cajal 2017-Física y Ciencias del Espacio.*Code or Reference:* RYC2017-22007*Funding Institution:* MICIU*Main Researcher:* Kathrin Wimmer*Duration:* June 2018-May 2024.**PROYECTOS CON LA INDUSTRIA / PROJECTS WITH INDUSTRIAL COMPANIES****NanoScreen: Disruptive portable device for pre-screening of Persistent Organic Pollutants –POPs- in food products and water.***Code or Reference:* 010103 - 801 - SAF*Company:* SAFTRA Photonics Ltd*Main Researcher:* Santiago Sánchez Cortés*Duration:* 2017-2019

Objectives: Development of plasmonic sensors for detection of pollutants at low concentration in water and foods.

3.3 DEPARTAMENTO DE FÍSICA MOLECULAR MOLECULAR PHYSICS

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

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

Funding Institution: EUROPEAN RESEARCH COUNCIL - SYNERGY GRANTS

Main Researcher: José Cernicharo Quintanilla

Main Researcher: (IEM-CSIC) Víctor J. Herrero

Duration: August 2014-July 2020

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

Planetary Atmospheres in the Laboratory: Quantifying the Energy Transfer Processes by Molecular Collisions.

Code or Reference: FIS2017-84391-C2-1-P

Funding Institution: MINECO (Spanish Ministry of Economy, Industry and Competitiveness)

Main Researcher: José Mª Fernández Sánchez and Salvador Montero Martín

Duration: January 2018-December 2020

Objectives: Experimental rate coefficients for V-V, V-T and R-T inelastic collisions, at low temperature and over room temperature, involving small molecules that play important roles in atmospheric, astrophysical, and combustion processes.

Hielo, gas y polvo en astrofísica de laboratorio.

Code or Reference: FIS2016-77726-C3-1-P

Funding Institution: Ministerio de Economía y Competitividad. **FEDER.**

Main Researchers: María Belén Maté and Isabel Tanarro.

Duration: December 2016-December 2020

Objectives: To provide experimental and theoretical information that can help in the analysis of ices in outer system bodies and in the interstellar medium; 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 RF plasmas with astrophysically relevant species; study of analogs of interstellar carbonaceous dust.

3.4 DEPARTAMENTO DE FÍSICA MACROMOLECULAR

MACROMOLECULAR PHYSICS

Fibras y tejidos poliméricos avanzados con grafeno, otros materiales 2D y estructuras mesoporosas de fuentes de origen natural.

Code or Reference: MAT2017-88382-P

Funding Institution: MINECO

Main Researcher: Horacio G. Salavagione (ICTP-CSIC).

Duration: January 2018-December 2020.

Objectives: Sustainable development of new functional advanced fibres and textiles by the incorporation of 2D laminar materials (graphene, MoS₂, BN).

PROYECTOS CON LA INDUSTRIA / PROJECTS WITH INDUSTRIAL COMPANIES

Melt and solid state characterization of PE/EVOH blends from barrier film scrap recycling.

Code or Reference: Research Agreement N° 254654

Company: DOW Chemical Ibérica

Main Researcher: Javier Martínez-Salazar

Other Participants: Juan F. Vega, Javier Ramos and Virginia Souza-Egipsy

Duration: 1st of April 2018 - 30th of June 2019

Objectives: Optimization of recycling processes.

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: Javier Martínez-Salazar

Other Participants: Víctor L. Cruz, Juan F. Vega, Javier Ramos and Virginia Souza-Egipsy

Duration: 1st of December 2019- 31st of May 2021

Objectives: Dual study of antibody-HER2 interactions with special relevance to biosimilar products

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

6th LISA Cosmology Working Group Workshop (*International non-EU congress*), Madrid (Spain), 14-18th of January 2019.

- *Quantum gravity and gravitational-wave astronomy* (Oral contribution), Gianluca Calcagni.

VII Tux Workshop on Quantum Gravity (*International non-UE congress*), Tux (Austria), 11-15th of February 2019.

- *Perturbations in Hybrid Loop Quantum Cosmology: Continuum Limit in Fourier Space* (Oral contribution), Guillermo A. Mena Marugán and Beatriz Elizaga Navascués.
- *Hamiltonian Diagonalization in Hybrid Quantum Cosmology* (Oral contribution), Beatriz Elizaga Navascués and Guillermo A. Mena Marugán.

2019 YITP Asian-Pacific Winter School and Workshop on Gravitation and Cosmology (*International non-EU congress*), Kyoto (Japan), 11-15th of February 2019.

- *Gravitational-wave astronomy in quantum gravity* (Oral contribution), Gianluca Calcagni.

The fourth MOLIM General Meeting (*International UE congress*), Bologna (Italy), 27th of February-1st of March 2019.

- *Torsional overtones of dimethyl-ether* (Invited talk), María Luisa Senent Diez, Miguel Carvajal, Jose María Fernández and Guzmán Tejeda.

APS March Meeting 2019 (*International non-UE congress*), Boston (USA), 4th-8th of March 2019.

- *Kohn-Luttinger superconductivity in twisted bilayer graphene* (Oral contribution), José González and Tobias Stauber.

DPG-Frühjahrstagung München19 (*International non-UE congress*), Munich (Germany), 17-22nd of March 2019.

- *Hamiltonian Diagonalization in Hybrid Quantum Cosmology* (Invited talk), Beatriz Elizaga Navascués and Guillermo A. Mena Marugán.

IAU Symposium 350, Laboratory Astrophysics: From observations to Interpretation (*International non-UE congress*), Cambridge (UK), 14-19th of Abril 2019.

- *Understanding Propyl-cyanide and its isomers formation: Ab initio study of the reaction kinetics* (Contributed talk), Boutheina Kerkeni and María Luisa Senent Diez.

XI Jerte Advanced Relativity Meeting (*National congress*), Condemios de Arriba, Guadalajara (Spain), 23-26th of May 2019.

- *Gauge without gauge*, Luis J. Garay.

Nanoscience Summer School @Yachay 2019 (*International non-UE congress*), Puerto Ayora (Ecuador), 26th of May-1st of June 2019.

- *Topological semimetals in external fields* (Contributed talk), Rafael Molina.

String Theory and Cosmology-Gordon Research Conference (*International non-EU congress*), Castelldefels (Spain), 16-21st of June 2019.

- *Quantum gravity and gravitational waves* (Oral contribution), Gianluca Calcagni.

Loops'19 (*International non-UE congress*), State College (USA), 17-21st of June 2019.

- *The MMO prescription for the Dapor-Liegner model* (Oral contribution), Guillermo A. Mena Marugán and Alejandro García-Quismondo.
- *Hybrid Loop Quantum Cosmology* (Plenary talk), Beatriz Elizaga Navascués and Guillermo A. Mena Marugán.

Spanish Researchers in the UK (*International UE congress*), Liverpool (UK), 28-30th of June 2019.

- *Dancing till the end of gravitational collapse: Black stars* (Invited talk), Luis J. Garay.

Trivulgando (*National congress*), Residencia de Estudiantes, CSIC, Madrid, 1st of July 2019.

- *Divulgación para enseñanza media: mi experiencia personal* (Plenary talk), Jesús Fernando Barbero González.

Encuentros Relativitas Españoles (*International UE congress*), Valencia (Spain), 6th of July 2019.

- *Quantum fields and gravity* (Invited talk), Luis J. Garay.

General Relativity 22 (*International non-UE congress*), Valencia (Spain), 7-12th of July 2019.

- *Gauge without gauge* (Oral contribution), Luis J. Garay.

XXXVII Reunión Bienal de la Real Sociedad de Física (*National congress*), Zaragoza (Spain), 15-19th of July 2019.

- *Spectroscopy of relevant non-rigid molecules of astrophysical interest: ethylene glycol and dimethyl-ether* (Invited talk), María Luisa Senent Diez.

24th European Conference on Few-body Problems in Physics (*International UE congress*), University of Surrey, Guildford (United Kingdom), 1st-6th of September 2019.

- *Weakly bound nuclei: A unified description of intrinsic and relative degrees of freedom* (Invited talk), Eduardo Garrido.

Jurekfest (*International non-UE congress*), Warsaw (Poland), 16-20th of September 2019.

- *Primordial Fluctuations in Loop Quantum Cosmology* (Plenary talk), Guillermo A. Mena Marugán.
- *The geometric exegesis of the Dirac algorithm* (Plenary talk), Jesús Fernando Barbero González.

XXIII International School on Nuclear Physics, Neutron Physics and Applications (*International UE congress*), Varna (Bulgaria), 22-28th of September 2019.

- *Elastic magnetic electron scattering from odd-A nuclei* (Invited talk), Pedro Sarriuguren.

DESY Theory Workshop “Quantum Field Theory Meets Gravity” (*International non-UE congress*), Hamburg (Germany), 24-27th of September 2019.

- *Cosmological Perturbations in Hybrid Quantum Cosmology* (Plenary talk), Beatriz Elizaga Navascués and Guillermo A. Mena Marugán.

Kick-off Meeting COST Action CA18108: QG-MM (Quantum Gravity phenomenology in the Multi-Messenger approach) (*International EU congress*), Barcelona (Spain), 2-4th of October 2019.

- *Signatures of quantum gravity in gravitational-wave observables* (Oral contribution), Gianluca Calcagni.

Workshop on Nonrigid Molecules in Atmospherical and Astronomical Environments (*International UE congress*), Huelva (Spain), 3rd-4th of October 2019.

- *Organic non-rigid molecules with (at least) three interacting torsions* (Invited talk), María Luisa Senent Diez.
- *Characterization and formation of the C₃O₃H₆ isomers* (Invited talk), Victoria Guadalupe Gámez and María Luisa Senent Diez.

Hangzhou International Meeting on Gravitational Waves (*International non-UE congress*), Hangzhou (China), 11-14th of October 2019.

- *Primordial Fluctuations in Hybrid Loop Quantum Cosmology* (Plenary talk), Guillermo A. Mena Marugán.

XVI Encuentro Xalapeño de Física (*Regional non-UE congress*), Xalapa (Mexico), 21st-25th of October 2019.

- *De la solución exacta del modelo BCS a los modelos integrables de Richardson-Gaudin* (Colloquium), Jorge Dukelsky.

XI CPAN days (*National congress*), Oviedo, 21-23rd of October 2019.

- *Loop quantum dynamics of the primordial Universe* (Oral contribution), Alejandro García-Quismondo and Guillermo A. Mena Marugán.
- *Fock Quantization of the Dirac Field in Hybrid Quantum Cosmology* (Oral contribution), Santiago Prado Loy.

Quantum Science & Technologies (*International non-UE congress*), Braga (Portugal), 22nd-24th of October 2019.

- *Impact of electric fields on surface states in topological semimetals* (Poster), Yuriko Baba, A. Díaz-Fernández, R.A. Molina, E. Díaz, F. Domínguez-Adame.

DYMCOM, Dynamical Methods for Cold Molecular collisions, from laboratory to beyond the Earth, (*International non-UE congress*), Institute Pascal, Université Paris-Dauphine, Orsay, Paris (France), 3rd-9th of November 2019.

- *Spectroscopy of non-rigid organic species: theory, experiments and application to Astrochemistry* (Invited talk), María Luisa Senent Diez.

III Cosmological Olentzero Workshop (*National congress*), Bilbao (Spain), 19th of December 2019.

- *Signatures of quantum gravity in gravitational-wave observables* (Oral contribution), Gianluca Calcagni.

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

III Congreso Internacional Hispanoamericano de Historia de la Construcción 2019 (*International non-UE Congress*), Ciudad de México (Mexico), 21st- 25th of January 2019.

- *Evolución superficial de la Fachada del S. XVI del Rectorado de la Universidad de Alcalá de Henares-España* (oral contribution), E. Castaño, G. Pérez, G. García-Rosales, E. Asensio, S. Martínez-Ramírez, C. Alonso, F. Martín-Consuegra, I. Sánchez de Rojas, A. Guerrero, I. Oteiza.

Magisol Meeting (*International non-UE Congress*), Geneva (Switzerland), 7th- 8th of February 2019.

- *R3B Experiments 2019* (Oral presentation), O. Tengblad.
- *IS577 Argon 33 & Argon 31 Beta --> 3p* (Oral presentation), I. Marroquín Alonso.
- *IS633 ⁸B decay to ⁸Be* (Oral presentation), S. Viñals I Onses.
- *Elastic scattering of ¹⁵C on heavy targets near the Coulomb barrier* (Oral presentation), J. Diaz Ovejas.
- *DAQ, electronics and software* (Oral presentation), A. Perea.

Quantum Nanophotonics Conference 2019 (*International non-UE Congress*), Benasque (Spain), 17th-23rd of March 2019.

- *Topological Nanophotonics* (Invited talk), V. Giannini.

Discussions on Nano & Mesoscopic Optics (DINAMO) (*International non-EU congress*), Galápagos (Ecuador) 22-26th of April 2019.

- *Bound States in the Continuum in resonant electric and/or magnetic dipole metasurfaces* (Invited talk), D. R. Abujetas, J. J. Sáenz, and J. A. Sánchez-Gil.
- *Bound States in the Continuum: Coupling Through Symmetry Breaking* (e-Poster), D. R. Abujetas, J. J. Sáenz, and J. A. Sánchez-Gil.

Symposium INCT-FNA (*International non-UE Congress*), Rio de Janeiro (Brasil), 27th-30th of May 2019.

- *Physics with Light Exotic Beams* (keynote talk), M.J.G. Borge.

Spring Meeting of the European Materials Research Society (E-MRS 2019), (*International non-UE Congress*), Nice (France), 27th-31st of May 2019.

- *Topological Nanophotonics* (Invited talk), V. Giannini.

14th Mediterranean Workshop and Topical Meeting "Novel Optical Materials and Applications" (NOMA 2019), (*International non-UE Congress*), Cetraro (Italy), 2nd-8th of June 2019.

- *Extraordinarily transparent compact metallic metamaterials* (Invited talk), V. Gianini.

5th Historical Mortars Conference 2019 (*International Congress*), Pamplona (Spain), 19th-21st of June 2019.

- *Synthesis of nanolime in sugary solutions* (Oral presentation), S. Martínez-Ramírez, L.R. Higuera, I. Cascales, M. Martin-Garrido.

XXXVII Bienal de Física (*National Congress*), Zaragoza (Spain), 15th-19th of July 2019.

- *The ISOLDE Facility: Present Status and Future Perspectives* (Invited plenary), M.J.G. Borge.
- *Halo effects in the low-energy scattering of ¹⁵C with heavy targets* (Oral presentation), J. Diaz Ovejas
- *Latest advances in the study of ⁸B nuclear structure* (Oral presentation), S. Viñals I Onses, O. Tengblad, E. Nacher, M.J.G. Borge

10th International Conference on Metamaterials, Photonic Crystals and Plasmonics (META 2019), (*International non-UE congress*), Lisbon (Portugal), 23rd-26th of July 2019.

- *Generalized Brewster conditions & BICs in metasurfaces through a CEMD model* (Invited talk), D. R. Abujetas, J. J. Sáenz, and J. A. Sánchez-Gil.
- *Extraordinary transparent compact metallic metamaterials* (Invited talk), V. Giannini.

The 27th International Conference of Nuclear Physics (INPC 2019) (*International non-UE congress*), Glasgow (UK), 29th of July-2nd of August 2019.

- *Electron capture and β+ decay of ⁸B into the highly excited states of ⁸Be* (Oral presentation), M.J.G. Borge, S. Vinals, A. Gad, P. Figuera, L. Fraile, H. Fynbo, J. Jensen, B. Jonson, R. Lica, I. Marroquin, M. Munch, E. Nacher, T. Nilsson, J. Ovejas, A. Perea, J. Refsgaard, K. Riisager, C. Sotty and O Tengblad.

IUPAP C12 and WG9: Nuclear Science Symposium (*International non-UE congress*), London (UK), 2nd-3rd of August 2019.

- *ISOL-Based and Fragmentation-based production of Rare isotope Beams* (Invited talk), M.J.G. Borge.

Euroschool on Exotic Beams (*International non-UE congress*), Aarhus (Denmark), 26th-31st of August 2019.

- *Halo Effects in the low-energy scattering of ¹⁵C with heavy targets* (Poster), J. Diaz Ovejas.
- *Latest advances in the study of ⁸B nuclear structure* (Poster), S. Viñals I Onses.

Mazurian Lakes Conference on Physics (*International non-UE congress*), Piaski (Poland), 2nd - 7th of September 2019.

- *Halo effects in the low-energy scattering of ¹⁵C with heavy targets* (Oral presentation), J. Díaz Ovejas.
- *Electron capture o ⁸B into the highly excited states of ⁸Be* (Oral presentation), S. Viñals I Onses.

11th International Conference on Structure and Stability of Biomacromolecules-SSB 2019- (*International non UE-Congress*), Slovak Academy of Sciences (Slovakia), 3rd-6th of September 2019.

- *The interaction of Peptides with Nanoparticles* (Invited Lecture), S. Sánchez-Cortés.

10th International Congress on the Application of Raman Spectroscopy in Art and Archaeology (RAA2019), (*International non-UE Congress*), Potsdam (Germany), 3rd-7th of September 2019.

- *FT-Raman, SERS and DFT analysis of safflower red dyed Japanese paper* (oral communication), MV. Cañamares, M.G. Mieites, M. Leona.

15th International Congress on the Chemistry of Cement 2019 (*International non-UE Congress*), Prague (Czech Republic), 16th-20st of September 2019.

- *Characterization and behaviour of eco-efficient cement matrices produced with kaolinite-based wastes as a future alternative pozzolan* (Oral presentation), M. Frias, R. Vigil de a Villa, R. García, S. Martínez-Ramírez, L. Fernández, I. Vegas, L. Caneda, E. Asensio, M.I. Sánchez de Rojas.
- *Hydrated phases in the pozzolan/lime system of cement matrices made from ash from thermal activation of coal waste* (Poster), I. Sanchez, R. García-Giménez, M. Casas Angulo, R. Vigil de la Villa, M. Ramírez-Fernández, V. Rubio-Fenández, M. Frias, S. Martínez-Ramírez, L. Fernandez, I. Vegas.

Workshop on Modern Scattering Techniques with Neutrons and X-rays, (*International non-UE congress*), Aachen (Germany), 1st-2nd of October 2019.

- *Outstanding quantum phenomena in solid molecular hydrogens: from the bulk case to extreme one-dimensional confinement* (Invited talk), C. Cabrillo.

XI CPAN Days (*National congress*), Oviedo (Spain), 21st-23th of October 2019.

- *Funding FPA/FPN in Spain* (Oral presentation), M.J.G. Borge, E. Gámiz, Celso Martínez Rivero.
- *Study of the scattering of ¹⁵C at near barrier energies* (Oral presentation), J. Díaz Ovejas.
- *Latest advances in the study of the ⁸B nuclear structure* (Oral presentation), S. Viñals I Onses.

1st International Congress of Construction and Demolition Waste Recycling (C&D Waste) 2019 (*International non-UE Congress*), Madrid (Spain), 30th-31st of October 2019.

- *Innovative Circular Extralightweigh Cement Mortar Containing Inorganic Recycled Building Materials for the Manufacturing of Toologically Optimized 3D Printing Architectural Products (CUMEM3d Project)* (oral presentacionl), M. Frias, I. Vegas, J. Moreno-Juez, S. Martínez-Ramírez, R. García, R. Vigil de la Villa, E. Goiti-Ugarte, I Calderón, L. Fernández, E. Lahoz.

Architectural Heritage: Science, Issues and Prospects (RIPAM 2019), (*International non UE-Congress*), Rabat (Morocco), 20th-22nd of November 2019.

- *Raman Spectroscopy Applied into the Evaluation and Restoration of Architectural Heritage* (Invited talk), Sagrario Martínez-Ramírez.

EPIC Meeting and ISOLDE Workshop and Users Meeting 2019 (*International non UE-Congress*), CERN, Geneva (Switzerland), 4th-7th of December 2019.

- *Halo effects in the low-energy scattering of ¹⁵C with heavy targets* (Oral presentation), J. Díaz Ovejas.

Carte, penne, inchiostri, imaging 3d e ristauro digitale (*National Congress*), University of Bologna (Italy), 6th of December 2019.

- *Raman Spectroscopy of iron gall inks* (Invited lecture), Mercedes Iriarte, S. Sánchez-Cortés.

4.1.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS

Workshop on Energetic Processing of Large Molecules, EPoLM-4 (*International EU*), Madrid (Spain), 3th-6th of March 2019.

- *Broad Band rotational spectroscopy and the characteristics of plasmas* (Invited Talk), Isabel Tanarro, R. J. Peláez, J. L. Doménech, V. J. Herrero, C. Bermúdez, E. Moreno, P. de Vicente, J. D. Gallego, F. Beltrán, J. M. Hernández, S.I. Ramírez, K. Lauwaet, G. Santoro, J. A. Martín-Gago, B. Alemán, J. R. Pardo and J. Cernicharo.
- *Carbonaceous nanoparticles in cold hydrocarbon plasmas* (Invited Talk), Víctor J. Herrero, Miguel Jiménez-Redondo, Ramón J. Peláez, Lidia Diaz-Pérez, Belén Maté and Isabel Tanarro.

ECONOS 2019 (*International non-EU*), Rouen (France), 7th-10th of April 2019.

- *Measurements of Pressure Broadening and Shifting of the First Rotational lines of HD in the HD-He Collisional System by Stimulated Raman Spectroscopy* (Poster), Raúl Z. Martínez and Dionisio Bermejo.

Humboldt Colloquium 2019, (*International EU congress*), 11th-13th of April 2019, Madrid (Spain).

- *Laboratory Investigations on Cosmic Dust and Ice* (Poster), V. J. Herrero, I. Tanarro, B. Maté, M. Jiménez-Redondo, R. J. Peláez, G. Molpeceres and R. Escribano.

Workshop on Interstellar Matter 2019 (ILTS Symposium) 1st IAU Symposium on Laboratory Astrophysics: From Observations to Interpretation IAU S350, (*International non-UE congress*), 14th-19nd of April 2019, Cambridge, (UK).

- *Adsorption of volatile molecules on interstellar carbonaceous dust analogs* (Poster), V. J. Herrero, B. Maté, I. Tanarro, M. Jiménez-Redondo, R. Peláez and R. Escribano.

Workshop: Astrophysics laboratory on cosmic organic and ices. (*National congress*), Alcoy (Spain), 22th of May 2019

- *Partículas carbonáceas generadas en plasmas* (Oral presentation), Miguel Jiménez-Redondo, Ramón J. Peláez, Lidia Diaz-Pérez, Belén Maté, Víctor J. Herrero, Isabel Tanarro.
- *Desorption of volatile molecules from interstellar carbonaceous dust analogs* (Oral presentation), V. J. Herrero, B. Maté, I. Tanarro, M. Jiménez-Redondo, R. J. Peláez, R. Escribano.
- *Water. What else? ASW computational study and experimental comparison* (Oral presentation), M.A. Satorre, P.C. Gómez and R. Escribano.

VI Reunión de Ciencias Planetarias y Exploración de Sistema Solar, CPES 6. (*National congress*), INTA Torrejón de Ardoz (Madrid). 27-29th of May, 2019.

- *Methane diffusion in water ice: relevance in the Solar System.* Belén Maté, Germán Molpeceres, Juan Ortigoso, Rafael Escribano, Isabel Tanarro, Victor J. Herrero, Manuel Domingo, Ramón Luna, Carlos Millán, Carmina Santonja and Miguel Á. Satorre.

NanoSpain 2019, (*National congress*), Barcelona (Spain), 28th-31st May 2019.

- *Carbon nanoparticles as cosmic dust analogues* (Oral presentation). Lidia Martínez, Gonzalo Santoro, Pablo Merino, Mario Accolla, Koen Lauwaet, Jesús M. Sobrado, Hassan Sabbah, Ramón Peláez, Victor J. Herrero, Isabel Tanarro, José Ignacio Martínez, Marcelino Agúndez, Pedro de Andrés, Gary Ellis, Christine Joblin4, José Cernicharo6 and José A. Martín-Gago.

47th International Symposium on Molecular Spectroscopy, (*International non-EU congress*), 17th-21st of June 2019, Champaign-Urbana, Illinois (USA).

- *The Nanocosmos gas cell: a broadband Fourier transform millimeter-wave spectrometer based on radio astronomy receivers.* (Oral presentation), C. Bermúdez, C. Cabezas, I. Tanarro, J. L. Doménech, V. J. Herrero, J. D. Gallego, Pablo de Vicente, F. Tercero, J. A. López Pérez, J. Cernicharo
- *The millimeterwave spectrum of succinonitrile.* (Oral presentation), C. Cabezas, C. Bermúdez, J. D. Gallego, I. Tanarro, J. L. Doménech, V. J. Herrero, B. Tercero, R. Lebrón, J. E. Quintanilla, A. C. Soria, J. Cernicharo
- *The nanocosmos gas cell as a tool for spectroscopy: the millimeterwave spectrum of n-ethylformamide.* (Oral presentation), C. Bermúdez, C. Cabezas, J. D. Gallego, J. Manuel Hernández, I. Tanarro, J. L. Doménech, V. J. Herrero, B. Tercero, A. C. Soria, R. Lebrón, J. E. Quintanilla, J. Cernicharo.

X Iberian Conference on Tribology-XI Iberian Vacuum Conference, IBERTRIVA, (*International Spain-Portugal congress*), 26th-28th of June 2019, Sevilla (Spain).

- *Characterization of capacitively coupled RF plasmas for the generation of nanoparticles of astrophysical interest* (Oral presentation), M. Jiménez-Redondo, R. J. Peláez, L. Díaz-Pérez, B. Maté, I. Tanarro and V. J. Herrero.
- *Surface interaction of volatile molecules with interstellar carbonaceous dust analogs* (Poster), V. J. Herrero, B. Maté, I. Tanarro, M. Jiménez-Redondo, R. J. Peláez and R. Escribano.

XXXVII Reunión Bienal de la Real Sociedad Española de Física, (National congress), Zaragoza (Spain), 15th-19th of July 2019.

- *Characterization of interstellar carbonaceous dust analogs produced in RF capacitively coupled discharges* (Oral presentation). M. Jiménez-Redondo, L. Díaz-Pérez, R. J. Peláez, B. Maté, I. Tanarro and V. J. Herrero.
- *Radio-astronomy emission techniques and cold plasmas to study molecular species and processes of astrophysical interest* (Oral presentation). I. Tanarro, C. Bermúdez, C. Cabezas, R. J. Peláez, J. L. Doménech, V. J. Herrero, P. de Vicente, J. D. Gallego, F. Beltrán, J. M. Hernández, S.I. Ramírez, E. Moreno, G. Santoro, J. A. Martín-Gago and J. Cernicharo.
- *Adsorption of volatile molecules on interstellar carbonaceous dust analogs* (Poster). B. Maté, I. Tanarro, M. Jiménez-Redondo, R. Peláez and V. J. Herrero.

The 26th Colloquium on High Resolution Molecular Spectroscopy, (International non-UE congress), 26th-30th of August 2019, Dijon (France).

- *Collisional broadenings and shifts in the S0(0), S0(1) and S0(2) rotational lines of HD perturbed by He: Comparison of Raman experimental and calculated data* (Poster), Piotr Wcislo, Franck Thibault, Raúl Z. Martínez and Dionisio Bermejo.

XT2019: The physics and Chemistry of the Interstellar Medium. (International non-UE congress) Palais des Papes-Avignon, (Francia), 2-6th of September 2019.

- *Adsorption of volatile molecules on interstellar carbonaceous dust analogs* (Invited Talk). Belén Maté, Isabel Tanarro, Miguel Jiménez-Redondo, Ramón Peláez, Vicente Timón and Víctor J. Herrero.

1st Workshop on Nonrigid Molecules in Atmospherical and Astronomical Environments (International UE congress), Huelva, 3rd-4th of October 2019.

- *Raman spectroscopy of nonrigid molecules in supersonic jets* (Invited talk), J. M. Fernández.

International Symposium on Thermal Effects in Gas flows in Microscale ISTEGRIM 2019 (International UE congress), Ettlingen (Germany), 24th of October 2019.

- *Non Intrusive Diagnostics of Micro-Flows by Raman Spectroscopy* (Plenary conference), S. Montero.

4.1.4 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

APS March Meeting 2019 (International Non-UE congress), Boston, (USA), 4-8th of March 2019.

- *Quantitative mechanical and electrical assessment by local probe methods of inkjet-printed PEDOT:PSS thin films* (Oral contribution), E. Gutierrez-Fernandez , I.A. Gabaldon-Saucedo , M. C. Garcia-Gutierrez , A. Varea, A. Nogales , E. Rebollar , A. Vila , A. Cirera , T. Ezquerre

POLY-CHAR 2019: Polymers for Sustainable Development (International non-UE congress), Kathmandu (Nepal), 19-23rd of May 2019.

- *Nanoindentation in Polymer-Based/graphene composites* (Invited talk), Araceli Flores, Patricia Enrique-Jimenez, Susana Quiles-Díaz, Marián A. Gómez-Fatou, Fernando Ania, Horacio J. Salavagione.

E-MRS Spring Meeting (UE congress), Niza (France), 27-31st of May 2019.

- *Laser nanostructuring of PEDOT:PSS and its influence on the electrical properties* (Oral contribution), E. Gutiérrez, I. Gabaldón, M.C. García-Gutiérrez, A. Nogales, A. Rodríguez-Rodríguez, A. Cirera, A. Varea, A. Vilà, T.A. Ezquierro, E. Rebollar.

IX AUSE Congress & IV ALBA User Meeting (UE congress), Cerdanyola del Vallès, Barcelona, 8-11th of October 2019.

- *Confinement effects in nanowires of polymer semiconductors and their photovoltaic blends studied by nanofocus x-ray beams* (Oral contribution), J.J. Hernández, I. Puente-Orench, T.A. Ezquerro, E. Gutiérrez-Fernández and M.C. García-Gutiérrez.
- *Structure development in polymers during fuse filament fabrication: an in-situ small and wide angle x-ray scattering study* (Oral contribution), A. Nogales, E. Gutiérrez, M.C. García-Gutiérrez, T.A. Ezquerro, E. Rebollar, I. Šics, M. Malfois, S. Gaidukovs, K. Celms, G. Bakradze.
- *Block copolymer self-assembly kinetics by GISAXS.* (Oral contribution), M. Fernández-Regúlez, E. Solano, C. Pinto-Gómez, S. Gottlieb, E. Gutiérrez, A. Nogales, M. C. García-Gutiérrez, T. Ezquerro, J. Fraxedas, F. Pérez-Murano.

18th ECASIA (European Conference on Applications of Surfaces and Interface Analysis (UE Congress), Dresden, Germany, 15-20th of September 2019.

- *Functional polymer surfaces by nanostructuring: From Fundamentals to Applications* (Keynote Talk), T.A. Ezquerro.

International Discussion Meeting on Polymer Crystallization (*International Non-EU congress*), San Sebastián, (Spain). 20-23rd of October 2019. Asistencia bajo invitación.

- *Study of the miscibility of linear PE with low density PE and poly(ethylene-co-1-hexene) through single crystals melting point analysis* (Poster) J. Martínez-Salazar.
- *New findings in polyethylene single crystals* (InvitedTalk) J.F. Vega.

WORKSHOP ‘Polymers at the Nanoscale’ (*International Non-EU congress*), Princeton, (USA). 31st of October-2nd of November 2019.

- *Confinement during Polymer Crystallization and Polymer Crystallization under Confinement* (Invited talk) A. Nogales.

4.2. ESTANCIAS DE INVESTIGADORES EN EL INSTITUTO VISITORS

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

- ❖ Prof. Alexander López, Escuela Superior Técnica del Litoral, Ecuador, 18-28th of February 2019.
- ❖ Prof. Laurent Margués, Université de Lille, France, 4-8th of March 2019.
- ❖ Prof. Boutheina Kerkeni, Université de Manaouba, Tunisia, 7-14th of August 2019.
- ❖ Dr. Samira Dalbouha, Université Mohammed V de Rabat, Morocco, 6-31st of August 2019.
- ❖ Dr. Malek Bou Kallaba, Université de Manaouba, Tunisia, 19th of August-6th of September 2019.
- ❖ Prof. Anton Antonov, Bulgarian Academy of Sciences, Bulgaria, 5-12th of September 2019.
- ❖ Dr. Dimiter Kadrev, Bulgarian Academy of Sciences, Bulgaria, 5-12th of September 2019.
- ❖ Prof. Francisco Meléndez Bustamante, Benemérita Universidad de Puebla, Mexico, 9-13th of September 2019.
- ❖ Dra. María Eugenia Castro Sánchez, Benemérita Universidad de Puebla, Mexico, 9-13th of September 2019.
- ❖ Prof. Alexander López, Escuela Superior Técnica del Litoral, Ecuador, 12-23rd of September 2019.
- ❖ Mr. Hamza el Hadki, Université Mohammed V de Rabat, Morocco, 8th of October-9th of November 2019.
- ❖ Prof. Diego Alcoba, Universidad de Buenos Aires, Argentina, 3rd-17th of November 2019.

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

- ❖ Dipl. Ing. Martin Schnedit, Institute of Experimental Physics, Graz University of Technology, Austria, 21st of January- 4th of February 2019.
- ❖ Daniel Fraile, University Degree thesis student, Universidad Autónoma de Madrid, Spain, 1st of February- 30th of April 2019.
- ❖ Rosalía López Méndez, University Degree thesis student, Universidad Autónoma de Madrid, Spain, 1st February- 30th of April 2019.
- ❖ Dr. Belén Hernández Associated Professor, Université Paris 13, Paris, France, 17th-21st of February, 14th-18th of May 2019.
- ❖ Prof. Mahmoud Ghomi, Full Professor, Université Paris 13, Paris, France, 17th-21st of February, 14th-18th of May 2019.
- ❖ Jessica Rampazzo, Erasmus Student, University of Bologna, Italy, 1st of March-31st of August 2019.
- ❖ Giulia Zanasi, Erasmus Student, University of Bologna, Italy, 3rd of March-2nd of September 2019.
- ❖ Iker Marcaida, Predoctoral researcher, Departamento de Química Analítica, Universidad del País Vasco (UPV/EHU), Spain, 4th March-4th of June 2019.
- ❖ Dr. Zuzana Jurasekova, Assistant Professor, P.J. Safarik University of Kosice, Slovak Republic, 28th of March-10th of April 2019.
- ❖ Sonia Ulic, Facultad de Ciencias Exactas, Universidad Nacional de La Plata, Argentina, 15th of April-15th of May 2019.
- ❖ Dr. Razvan Lica, Department of Nuclear Physics (DFN), Bucharest, Romania, 7th-14th of May 2019.

- ❖ **Dr. Daniel Jancura**, Associated Professor, P.J. Safarik University of Kosice, Slovak Republic, 13th-14th of May 2019.
- ❖ **Prof. Pavol Miskovsky**, Full Professor, P.J. Safarik University of Kosice, Slovak Republic, 13th-14th of May 2019.
- ❖ **Dr. Freddy Celis**, Associated Professor, Faculty of Sciences, Universidad de Playa Ancha, Chile, 24th of July - 7th of August 2019
- ❖ **Prof. Marcelo Campos-Vallette**, Full Professor, Faculty of Sciences, Universidad de Chile, 20th of August - 9th of September 2019.
- ❖ **Giorgio Galluzzi**, PhD Student, University of Bologna, Italy, 1st October-20th December of 2019.
- ❖ **Marcelo Dos Santos Oliveira**, Master Student, Universidade Nacional Estadual de Sao Paulo, Brazil, 8th of December 2019.
- ❖ **Dr. Luis Armando Acosta**, Facultad de Física, UNAM, Ciudad de Mejico, Mexico, 10th-20th of December 2019.

4.3. CONFERENCIAS DE INVESTIGADORES INVITADOS INVITED RESEARCHERS CONFERENCES

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

Dra. Francesca Vidotto.

Dept. de Física Teórica y de Historia de la Física, UPV/EHU, Bilbao.

How does a black hole die? Cosmological and astrophysical consequences.

17th January 2019

Prof. Alexander López.

Escuela Superior Técnica del Litoral, Ecuador.

Floquet phases in graphene like materials.

27th February 2019

Dr. Benjamín Montesinos.

Centro de Astrobiología, CSIC-INTA, Madrid.

El sol, un gran desconocido.

28th February 2019

Dr. Carlos Sabín.

Instituto de Física Fundamental, CSIC, Madrid.

Quantum simulation of transversable wormholes and exotic spacetimes.

28th February 2019

Dra. Ángeles Moliné.

Instituto de Física Teórica, UAM-CSIC, Madrid.

The challenge of indirect dark matter searches.

25th April 2019

Dr. Javier Olmedo.

Louisiana State University, Baton Rouge, USA.

Agujeros negros de Kruskal y su extensión cuántica.

28th May 2019

Prof. Marc Mars.

Universidad de Salamanca, Salamanca.

Kerr-de Sitter spacetime and conformal infinity.

13th June 2019

Prof. Madhavan Varadarajan.

Raman Research Institute, Bangalore, India.

Loop Quantum Gravity: A structural overview (II).

27th June 2019

Dr. Carlos Sopuerta.

Institute of Space Sciences, CSIC-IEEC, Barcelona.

*Pasado, presente y futuro de la astronomía de ondas gravitacionales.*19th November 2019**4.3.4 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS****Dr. Jaime Martín**

Universidad del País Vasco/Euskal Herriko Universtitatea - POLYMAT

*Revealing the absolute composition of organic solar cells by Fast Scanning Calorimetry.*1st of April 2019

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**Jorge Dukelsky Bercovich**

- Universidad de Buenos Aires, Argentina, 29th of June-17th of July 2019.
- Liaoning Normal University, China, 14th-21st of September 2019.
- Universidad Veracruzana, Mexico, 15th-26th of October 2019.

María Luisa Senent Diez

- Facultad de Química, Universidad Mohammed V, Morocco, 11th-25th of September 2019.

Gianluca Calcagni

- University of Nagoya, Japan, 1-15th of August 2019.
- YITP, Kyoto, Japan, 16-31st of August 2019.

Álvaro Rubio García

- Universidad de Buenos Aires, Argentina, 29th of June-17th of July 2019.

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

- Departimento di Scienza e Tecnologia Agro-Alimentari, University of Bologna, Italy, 20th-31st of March, 23rd-31st of October 2019.
- Department of Biophysics, University “P. J. Safarik of Kosice”, Slovak Republic, 23rd of August- 6th of September 2019.

Olof Tengblad

- GSI, Darmstadt, Germany Exp. S444/473, 18th- 28th of February of 2019.
- TRIUMF, Vancouver, Canada, Exp S1847, 11th- 18th of July 2019.

Carlos Cabrillo García

- Institute Lau Langevin (ILL), Grenoble, France, 27th of May-6th of June 2019.

Sagrario Martínez Ramírez

- Pontificia Universidad Católica Madre y Maestra, Santo Domingo, Dominican Republic, 7th-14th of December 2019.

Diego Romero Abujetas

- Department of Materials Science and Engineering, Standford University, USA, October-November 2019.

4.4.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS

Isabel Tanarro Onrubia

- Culham Centre for Fusion Energy, Oxford (UK), 5th of December 2019. *Meeting of the Scientific Advisory Committee of the European 47th EPS Conference on Plasma Physics for the selection of plenary and invited speakers.*

José Luis Doménech Martínez

- I. Physicalisches Institut, Universität zu Köln, Cologne, Germany, 5th of May-2nd of June 2019.

Denís Paredes Roibás

- Universidad de Rennes, dos meses y medio (de principios de septiembre a mediados de noviembre de 2019). Proyecto: Cálculo ab initio de perfiles de líneas rovibrationales en sistemas colisionales molécula-átomo y molécula-molécula. Estancia predoctoral.

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

- *Constrained Hamiltonian Systems* -- Cursos de Máster de la Universidad de Valencia (National Official) -- Universidad de Valencia.
23rd-25th of January 2019 -- 4.5 hours.
- *El Siglo de la Física* -- Cursos de Humanidades de la UC3M- Grado (National Official) -- Universidad Carlos III de Madrid.
29th of January-26th of March 2019 -- 11 hours.

Guillermo A. Mena Marugán

- Tutor Prácticas Externas Curriculares, Grado en Ciencias Físicas (National Official), UCM.
4th of February-13th of June 2019 -- 306 hours. Alumnas: Alba Covelo e Irene Serrano

Rafael Alejandro Molina Fernández

- Tutor Prácticas Externas Curriculares, Grado en Ciencias Físicas (National Official), UCM.
4th of February-19th of April -- 150 hours. Alumna: Ana Palacios

Gianluca Calcagni

- *Estudio de cosmología y su divulgación científica* -- Máster en Astrofísica, Universidad Complutense de Madrid-Tutoría de "Práctica en Empresa" (National Official) -- IEM-CSIC.
March-August 2019 -- 150 hours – Estudiante: Raquel Galazo García
- *Estudio de cosmología y su divulgación científica* -- Máster en Astrofísica, Universidad Complutense de Madrid-Tutoría de "Práctica en Empresa" (National Official) -- IEM-CSIC.
March-August 2019 -- 150 hours – Estudiante: Carlos Rodríguez García

Luis J. Garay Elizondo

- *Métodos Matemáticos I* -- Grado de Física (National Official) -- Universidad Complutense de Madrid.
September-December 2019 -- 2 grupos, 60 hours.
- *Universo extraño* -- Universidad para los mayores (National Official) -- Universidad Complutense de Madrid.
September-December 2019 -- 4.5 hours.
- *Los agujeros negros y el modelo estándar* -- Curso de formación de profesores (National Official) -- Centro Territorial de Innovación y Formación Madrid-Sur, Leganés.
November-December 2019 -- 9 hours.

Enrique Benito Matías

- *Estadística Aplicada al Trabajo Social* -- Grado de Trabajo Social (National Official) -- Universidad Rey Juan Carlos.
September 2019-January 2020 -- 60 hours.
- *Matemáticas I* -- Grado Fundamentos de la Arquitectura (National Official) -- Universidad Rey Juan Carlos.
September 2019-January 2020 -- 60 hours.
- *Estadística Aplicada a las Ciencias Sociales* – Grado Relaciones Laborales y Recursos Humanos (National Official) -- Universidad Rey Juan Carlos.
February-May 2019 -- 60 hours.
- *Estadística Empresarial II* – Grado de Administración y Dirección de Empresas (National Official) -- Universidad Rey Juan Carlos.
February-May 2019 -- 60 hours.
- *Matemáticas Aplicadas al Paisajismo* – Grado de Paisajismo (National Official) -- Universidad Rey Juan Carlos.
February-May 2019 -- 60 hours.

Bogar Díaz Jiménez

- *Formulación geométrica del algoritmo de Dirac en presencia de fronteras* -- Curso de Doctorado y Máster (International) -- Benemérita Universidad Autónoma de Puebla (Méjico).
October-November 2019 -- 20 hours.

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

Olof Tenglad

- *Técnicas Experimentales Avanzadas en Física Nuclear* (prácticas de laboratorio)–Máster Interuniversitario de Física Nuclear (*National Official*) – Universidad de Sevilla.
14th-18th of January 2019 -- 40 hours.
- *Experimental Techniques in Plasma, Nuclear Physics and Material* (teoría)–European Master of Science in Nuclear Fusion and Engineering Physics (International)– Laboratory Projects 2019, Universidad Carlos III de Madrid.
4th, 14th and 21st of March – 2019 -- 12 hours.

Santiago Sánchez Cortés

- Tutor Prácticas Externas Curriculares, Grado en Farmacia (*National Official*), UCM.
21st of Octubre 2019-13th of May 2020 -- 150 hours. Alumno: Jackson Javier Padilla Molina

Mª Vega Cañamares Arribas

- *Sistemas automáticos miniaturizados, sensores y biosensores en análisis* – Máster en Ciencias y Tecnologías Químicas (*National Official*) – Facultad de Ciencias Químicas de la Universidad Complutense de Madrid.
11th of January 2019, 1 hour.
- *Plasmonic sensors: SERS* - Master Erasmus Mundus “Molecular nano- and biophotonics for telecommunications and biotechnologies”-Monabiphot- (*International*) – Facultad de Ciencias Químicas, UCM, Spain.
22th of February 2019 -- 2 hours.

Sagrario Martínez Ramírez

- *Ensayos y técnicas no destructivas aplicadas en la diagnosis de las construcciones históricas* – Master de la Universitat Politècnica de Valencia (*International*).
5th of February 2019 -- 3 hours.
- *Química del Cemento “Tomás Vázquez”*- Curso de Posgrado del CSIC (*International*), Organiza: Instituto de Ciencias de la Construcción “Eduardo Torroja” e Instituto Español del Cemento y sus Aplicaciones (IECA).
26th of Ferbruary-8th of March 2019 -- 5 hours.
- *Métrica aplicada al Patrimonio arquitectónico* – Curso de Especialización (*Nacional Official*), Colegio Oficial de Arquitectos de Madrid (COAM).
27th-29th of May 2019 -- 1 hour.
- *Nuevos retos en la caracterización y conservación de los bienes del Patrimonio Cultural* – Curso de Especialización (*International*), Universidad Internacional Menéndez Pelayo (UIMP).
2nd-5th of July 2019 -- 2 hours.

Diego Romero Abujetas

- *Técnicas Experimentales III* – Grado en Física (*National Official*) – Universidad Autónoma de Madrid.
January-March 2019 -- 35 hours.

5.1.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS

Belén Maté Naya

- Tutora Prácticas Externas Curriculares, Grado de Física (*National Official*), UCM.
February 1st of February-27th of March 2019 -- 150 hours. Alumna: María Pozo
- Tutora Prácticas Externas Curriculares, Grado de Química (*National Official*), UCM.
2nd of September-29th of November 2019 -- 150 hours. Alumno: Ricardo Carrasco

Vicente Timón Salinero

- Tutor Prácticas Externas Curriculares, Grado de Física (*National Official*), UCM.
29th of January-21st of March 2019 –150 hours. Alumno: Ismael Marcos
- Tutor Prácticas Externas Curriculares, Grado de Física (*National Official*), UCM.
4th of February-19th of April 2019 –150 hours. Alumna: Natalia Castillo

5.1.4 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

Javier Martínez-Salazar

- Tutor de Prácticas Extra-Curriculares – Física – Grado – National Official – UCM.
16th of December-30th of June 2019 – 300 hours. Alumna: Marina Robledano

Araceli Flores Aguilar-Amat

- *Experimental testing for mechanical characterization* – Master Degree in Materials Engineering (International). ETSI Caminos, Canales y Puertos, Universidad Politécnica de Madrid.
21st of October 2019 – 2 hours.
- *Organic Chemistry* – Degree in Biotechnology (National Official)- Universidad Europea de Madrid.
19th of December 2019 – 2 hours.
- Tutora de Práctica de Grado – Degree in Industrial Design and Product Development Engeeniging (National Official) UPM (ETS de Ingeniería y Diseño Industrial).
1st of January 2019-17th of June 2019 -- 594 hours. Alumna: Marta Castillo

Mari Cruz García Gutiérrez

- Tutura Prácticas Externas Curriculares, Grado en Ingeniería de Materiales (National Official), UCM.
4th of February-31st of May 2019 -- 125 hours. Alumno: Daniel Chico

Juan Francisco Vega

- Tutor de Trabajo de Fin de Grado – Ingeniería de Materiales – Grado – National Official – URJ.
1st of October 2018-30th of June 2019 -- 900 hours. Alumno: Alejandro Clemente
- *Reología* (Profesor Responsable) - Máster en Alta Especialización en Plásticos y Cauchos – Internacional - Universidad Internacional Menéndez Pelayo - Consejo Superior de Investigaciones Científicas.
14th of February-8th of March 2019 -- 12 hours.
- Tutor de Prácticas de Grado – Química – Grado – Nacional – Convenio con la Universidad de Alcalá de Henares.
2nd of September-20th of December 2019 -- 324 hours. Alumno: Andrés Cardil

Javier Ramos Díaz

- *Simulación Molecular* - Máster en Alta Especialización en Plásticos y Cauchos – Internacional - Universidad Internacional Menéndez Pelayo - Consejo Superior de Investigaciones Científicas.
18th of February-6th of March 2019 -- 14 hours.

5.2 CURSOS, CONFERENCIAS Y SEMINARIOS

COURSES, CONFERENCES AND SEMINARS

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

Jorge Dukelsky Bercovich

- *From the exact solution of the BCS model to the integrable Richardson-Gaudin models*, Liaoning Normal University (China), 17th of September 2019.
- *Higher rank Richardson-Gaudin models*, Liaoning Normal University (China), 17th of September 2019.
- *From the exact solution of the BCS model to the integrable Richardson-Gaudin models*, Universidad Nacional Autónoma de México (Mexico), 18th of October 2019.
- *Superconductividad cuántica y modelos exactamente solubles*, Universidad Veracruzana (Mexico), 25th of October 2019.

José González Carmona

- *El grafeno como modelo de fermiones en dos dimensiones*, “XVI Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia”, IEM-CSIC, Madrid (Spain), 11th of April 2019.

Gianluca Calcagni

- *Cosmología, ondas gravitacionales y gravedad cuántica*, “XVI Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia”, IEM-CSIC, Madrid (Spain), 11th of April 2019.

Rafael Alejandro Molina Fernández

- *Generalized Fluctuation Relations*, IFISC, Mallorca (Spain), 6th of March 2019.

Luis J. Garay Elizondo

- *Gauge without gauge*, Universidad del País Vasco, Bilbao (Spain), 27th of February 2019.

Bogar Díaz Jiménez

- *Enfoque geométrico del algoritmo de Dirac en presencia de fronteras espaciales*, Seminario del cuerpo académico de Partículas, Campos y Relatividad General, Facultad de Ciencias Físico- Matemáticas de la Benemérita Universidad Autónoma de Puebla (Mexico), 16th of August 2019.
- *Enfoque geométrico del algoritmo de Dirac en presencia de fronteras espaciales*, Seminario del Grupo de Geometría y Gravitación del departamento de Física, CINVESTAV-IPN (Mexico), 16th of October 2019.
- *Generalización de la acción de Husain-Kuchar en variedades con fronteras*. Seminario conjunto de los cuerpos académicos: Física Matemática y Relatividad General; Teoría de Campos, Gravitación y Cosmología; Física de Partículas Elementales. Facultad de Ciencias Físico Matemáticas, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla (Mexico), 25th of October 2019.

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

Santiago Sánchez Cortés

- *Plasmónica: detección molecular intensificada sobre nanoestructuras metálicas*, “XVI Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia”, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 10th of April 2019.
- *Recent Advances in Plasmonic-Enhanced Raman Scattering: Applications in Molecular Detection and Cultural Heritage*. Department of Molecular Sciences and Nanosystems
- Scientific Park - Ca' Foscari University of Venice, Italy, 28th of March 2019.
- *Spectroscopic Tools to Study Biomolecules*. Departimento di Scienza e Tecnologia Agro-Alimentari, University of Bologna, Italy, 26th March 2019.
- *Exploring Manuscripts by Means of Raman Spectroscopy*. Departamento di Studi Linguistici Culturali Comparati. Ca' Foscari University of Venice, Italy, 12th of June 2019.
- *FT-IR and Raman spectroscopy: rapid tools for studying agricultural, food and environmental samples*. Departimento di Scienza e Tecnologia Agro-Alimentari, University of Bologna, Italy, 22th October 2019.

Olof Tengblad

- *Física Nuclear (1): Anatomía de un experimento*, “XVI Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia: De las Partículas Elementales a los Sistemas de Alto Peso Molecular”, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 10th of April 2019.

Carlos Cabrillo García

- *La física de la materia desordenada*, “XVI Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia: De las Partículas Elementales a los Sistemas de Alto Peso Molecular”, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 10th of April 2019.
- *Simulación multiescala de procesos físico químicos de interés nano-tecnológico*-Entrevista con el grupo de investigación de Sistemas Carentes de Orden de Largo Alcance- “XVI Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia: De las Partículas Elementales a los Sistemas de Alto Peso Molecular”, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 10th of April 2019.

Vincenzo Giannini

- *XVI Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia: De las partículas elementales a los Sistemas de Alto Peso Molecular*, Organizer, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 9th-11th of April 2019.

Sagrario Martínez Ramírez

- *Técnicas espectroscópicas aplicadas al estudio del Patrimonio Histórico-Artístico*, “XVI Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia: De las Partículas Elementales a los Sistemas de Alto Peso Molecular”, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, Madrid, 10th of April 2019.

Jose Antonio Briz Monago

- *Física Nuclear (2): aplicaciones en física médica y astrofísica*., “XVI Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia: De las Partículas Elementales a los Sistemas de Alto Peso Molecular”, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 10th of April 2019.

- *Visitas guiadas a los laboratorios del IEM*, “XVI Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia: De las Partículas Elementales a los Sistemas de Alto Peso Molecular”, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 11th of April 2019.

Diego Romero Abujetas

- *Nanofotónica y metamateriales con nanoestructuras metálicas y semiconductoras*, “XVI Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia”, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 10th of April 2019.
- *HRI metafilms through an electric and magnetic dipole (CEMD) formulation: Bound States in the Continuum*, Department of Materials Science and Engineering, Stanford University, USA, 4th of October 2019.

5.2.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS

Belén Maté Naya

- *Hielos Astrofísicos*. “XVI Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia”, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 9th-11th of April 2019.
- *Visita al Laboratorio de Hielos del IEM* “XVI Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia”, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 9th-11th of April 2019.

José Luis Doménech Martínez

- *Astrofísica de laboratorio: espectroscopía de iones moleculares*. “XVI Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia”, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 9th-11th of April 2019.
- *Visita al Laboratorio de Espectroscopía Infrarroja de Alta Resolución*. “XVI Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia”, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 9th-11th of April 2019.

José M. Fernández Sánchez

- *Espectroscopía: una potente herramienta para conocer el Universo*, conferencia a estudiantes del Bachillerato de Excelencia, IES Francisco Umbral, Ciempozuelos (Madrid), 13th of February 2019.
- *Espectroscopía de microchorros: gases y líquidos fuera del equilibrio, part of the* “XVI Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia”, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 9th-11th of April 2019.
- *Visit to the Laboratory of Molecular Fluid Dynamics. Part* “XVI Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia”, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 9th-11th of April 2019.
- *Spectroscopy: a powerful tool to investigate the Universe*, seminario dentro del ciclo “De Madrid al Cosmos” organizado por el grupo de Gravitación y Cosmología del IEM, Madrid, 2nd of December 2019.
- *Espectroscopía: una potente herramienta para conocer el Universo*, conferencia a estudiantes del Bachillerato de Excelencia, IES Los Rosales, Móstoles (Madrid), 18th of December 2019.

Isabel Tanarro Onrubia

- *Visita guiada al Laboratorio de Plasmas Fríos*, Alumnos de 1º de Bachillerato del colegio Lourdes (FUHEM) de Madrid. 4th of June 2019.

Guzmán Tejeda Gala

- *Codirector del* “XVI Curso de iniciación a la investigación en estructura de la materia: de las partículas elementales a los sistemas de alto peso molecular”, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, Madrid, Spain, 9th -11th of April 2019.
- *Visit to the Laboratory of Molecular Fluid Dynamics. Part of* “XVI Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia”, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 9th-11th of April 2019.

Miguel Jiménez-Redondo

- *Plasmas a baja temperatura*, “XVI Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia”, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 9th-11nd of April 2019.
- *Visit to the Laboratory of Cold Plasmas*. “XVI Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia”, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 9th-11nd of April 2019.

5.2.4 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

Araceli Flores Aguilar-Amat

- *Nanoindentación en polímeros reforzados con grafeno*, XVI Curso de iniciación a la investigación en estructura de la materia: de las partículas elementales a los sistemas de alto peso molecular, Instituto de Estructura de la Materia, Madrid, 9th-11th of April 2019.

Juan Francisco Vega Borrego

- *Simulación y experimentos en Física Macromolecular*, XVI Curso de iniciación a la investigación en estructura de la materia: de las partículas elementales a los sistemas de alto peso molecular, Instituto de Estructura de la Materia, Madrid, 9th-11th of April 2019.
- *Rheology of polymers*, Departamento de Química Orgánica e Inorgánica, Facultad de Farmacia, Universidad de Alcalá de Henares, 28th of June 2019.
- *Microrheology of polymer solutions*, Universidad del País Vasco/Euskal Herriko Universtitatea - POLYMAT, San Sebastián, 24th of October 2019.

Javier Ramos Díaz

- *Introducción al modelado y simulación en ciencias de materiales usando Materials Studio*, Ciclo de seminarios Addlink, Facultad de Química, Universidad Complutense, Madrid, 9th of May 2019.
- *Introducción al modelado y simulación en ciencias de la vida usando Discovery Studio*, Ciclo de seminarios Addlink, Facultad de Ciencias, Universidad de Alcalá, Madrid, 9th of May 2019.
- *Modelización y simulación en ciencias químicas usando Materials Studio*, Ciclo de seminarios Addlink, Facultad de Ciencias, Universidad de Alcalá, Madrid, 28th of October 2019.
- *Introducción al modelado y simulación en ciencias de la vida usando Discovery Studio*, Ciclo de seminarios Addlink, Facultad de Ciencias, Universidad de Alcalá, Madrid, 29th of October 2019.
- *Una introducción a Discovery Studio para la modelización y simulación en ciencias de la vida*, Ciclo de seminarios Addlink, Webminar, 12th of December 2019.

Virginia Souza-Egipsy Sánchez

- *Aplicaciones de la microscopía electrónica en estructura de la materia*, XVI Curso de iniciación a la investigación en estructura de la materia: de las partículas elementales a los sistemas de alto peso molecular, Instituto de Estructura de la Materia, Madrid, 9th-11th of April 2019.

5.3 PREMIOS Y OTROS MÉRITOS

AWARDS

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

Guillermo Antonio Mena Marugán.

- External member of the *Committee for the Excellence of the PhD Program* in the Physics Faculty, Complutense University of Madrid.

Gianluca Calcagni.

- Specialty Chief Editor of Frontiers in Physics and Frontiers in Astronomy and Space Sciences, Cosmology section.
- Editor of ISRN Mathematical Physics.
- Reviewer of research proposals for the National Science Centre (Narodowe Centrum Nauki, NCN), Poland.

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

María José García Borge

- Member of the International Advisory Committee of the International Conference of Nuclear Physics (Glasgow, UK, 2019).
- Coordinator of Subarea *Nuclear and Particle Physics* of the State Research Agency.
- Member of the *Advisory Committee* of TRIUMF 2015-2020.

- Member of the *Scientific Advisory Committee* of GSI / Fair, Germany, 2016-2020.
- Member of the *Scientific Advisory Committee* of the Helmholtz Institute of Mainz, Germany 2016-2020.
- Member of the Scientific Comittee of the Canfranc Laboratory LSC.
- Member of the *Program Advisory Committee* of the KVI-center for Advanced Radiation Technology, Univ Groningen, Netherlands, 2016-2020.
- Member of the 20th *Program Advisory Committee* for Nuclear-Physics Experiments at RIKEN RI Beam Factory (NP-PAC), Japan, 2019-2021.

Olof Tengblad

- Spanish Representative of the *84th Meeting of the ISOLDE Collaboration Committee*, CERN (Switzerland), 19th of March 2019.
- Spanish Representative of the *85th Meeting of the ISOLDE Collaboration Committee*, CERN (Switzerland), 1st of July 2019.
- Member of the *Scientific Comittee of the Canfranc Laboratory LSC*.
- Technical *coordinator of the R3B collaboration*, GSI / Fair.
- Member of the *ERNCIP TG Radiological and Nuclear Threats to Critical Infrastructure*, European Comission.
- Swedish representative to the *GICNT-EC Workshop "Cunning Karl on Nuclear Detection Reachback Support"*, Karlsruhe, Germany, 12th-14th of February 2019.

Ricardo Fernández Perea

- Co-Leader of the *Task Group 1: Development of First-Principles Force Fields for Molecular Dynamics and Quantum-Monte-Carlo Simulation* of the COST Action CM1405: Molecules in motion (MOLIM) of the European Union.

M^a Vega Cañamares Arribas

- Secretary/Treasure of the *Spectroscopy Comitee of the Spanish Optical Society* (Spain).

Sagrario Martínez Ramírez

- Member of the Scientific Committee of *5th Historic Mortars Conference 2019*, Pamplona (Spain).

José Antonio Sánchez Gil

- OSA *Optics Express* Associate Editor.
- Guest *Editor: AIP Journal of Applied Physics Special Topic* on "Dielectric Nanoresonators and Metamaterials", November 2019.

5.3.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS**Belén Maté Naya**

- Secretary of the *Sociedad Española de Óptica- SEDOPTICA* (Spain) till February 2019.

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 (ESCAPEPIG)*.

Salvador Montero Martín

- Member of the Editorial Board of the *Journal of Raman Spectroscopy*, Wiley (United Kingdom).

José M. Fernández Sánchez

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

Isabel Tanarro Onrubia

- President of the board of the "Grup Especializado de Física de Plasmas" of the Real Sociedad Española de Física (Spain) till June 2019.
- Vocal of the board of the "Grup Especializado de Física de Plasmas" of the Real Sociedad Española de Física (Spain) from June 2019.
- Member of the *Scientific Advisory Committee of the European 47th EPS Conference on Plasma Physics, to be hold in Sitges (Spain)*, 22th-26th of June from March 2019.

Vicente Timón Salinero

- Member of the board of the *Sociedad Española de Mineralogía (SEM)* (Spain).

5.3.4 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS**Araceli Flores Aguilar-Amat**

- Member of the POLY-CHAR Scientific Committee.
- Member of the Committee for the following POLY-CHAR Awards: Richard Robert Ernst Polymer Science Award for young scientist; Jean-Marie Lehn Award for senior scientist and Pierre-Gilles de Gennes Award for Polymer Science and Technology.

Mari Cruz García Gutiérrez

- Spanish Delegate of the European Synchrotron Radiation Facility Council, since September 2014.
- CSIC representative of the SpLine-BM25 Scientific Committee at the European Synchrotron Radiation Facility since June 2015.
- Member of college 1: "Applied Physics, Instrumentation Techniques" of the "Institut Laue-Langevin" (ILL), since June 2018.

Juan Francisco Vega Borrego

- Member of the Executive Board of *Grupo Especializado de Reología (GER)* of Real Sociedad Española de Química (RSEQ).

**5.4 ACTIVIDADES Y MATERIAL DE DIVULGACIÓN
OUTREACH ACTIVITIES AND MATERIAL****5.4.1 DPTO. DE QUÍMICA Y FÍSICA TEÓRICAS / THEORETICAL PHYSICS AND CHEMISTRY****Jesús Fernando Barbero González**

Base 2, base3,...,base n: curiosidades de los sistemas de numeración
 Semana de la Ciencia en el IEM (talk uploaded to the Digital CSIC platform), Madrid
 12th of November 2019

Ciento cincuenta años de curiosidades de la Tabla Periódica
 Conferencia divulgativa – Semana de la Ciencia
 Instituto de Estructura de la Materia CSIC, Madrid
 12th of November 2019

Del Cosmos al nano... y más allá. Escape room para estudiantes entre 14 y 16 años
 Conferencia divulgativa – Semana de la Ciencia
 Instituto de Estructura de la Materia CSIC, Madrid
 15th of November 2019

Ciento cincuenta años de curiosidades de la Tabla Periódica
 IES José Luis Sampedro
 Tres Cantos (Madrid)
 17th of December 2019

Materiales Asombrosos
 IES José Luis Sampedro
 Tres Cantos (Madrid)
 17th of December 2019

La física de las interacciones fundamentales
 IES José Luis Sampedro
 Tres Cantos (Madrid)
 17th of December 2019

Guillermo A. Mena Marugán*Explorando en el vacío: el Big Bang y la física cuántica*

Conferencia de divulgación científica, Real Sociedad Económica Extremeña de Amigos del País, Badajoz

2th of May 2019*Explorando en el vacío: el Big Bang y la física cuántica*

Conferencia de divulgación científica, ETSI Minas, Madrid

12th of December 2019**Gianluca Calcagni***El universo para todos*

Conferencia para usuarios ciegos y sordociegos utilizando objetos táctiles, ONCE, Madrid

27th of June 1019*El universo para todos*

Conferencia divulgativa – Semana de la Ciencia

Instituto de Estructura de la Materia CSIC, Madrid

7th of November 2019**Rafael Alejandro Molina Fernández***La gran revolución científica de la Edad Moderna*

Ciclo de conferencias de divulgación, Aula de Humanidades de Guadarrama

Guadarrama (Madrid)

7th of May 2019**Álvaro Rubio García***Los sorprendentes usos cotidianos de la teoría de la relatividad y la física cuántica*

Conferencia divulgativa – Semana de la Ciencia

Instituto de Estructura de la Materia CSIC, Madrid

11th of November 2019**5.4.2 DPTO. DE ESPECTROSCOPIA NUCLEAR, VIBRACIONAL Y DE MEDIOS DESORDENADOS / NUCLEAR, VIBRATIONAL AND DISORDERED MEDIA SPECTROSCOPY****Carlos Cabrillo García***Ciencia a la carta*

Taller de divulgación científica “Menestra de planetas”

CEIP Enrique Tierno Galván

15th of May 2019.**Sagrario Martínez Ramírez**

Día Internacional de la Mujer y la Niña en la Ciencia

- Charla: “Grandes mujeres científicas en la historia: Rita Levi-Montalcini (Neurobióloga) y Rosalind Franklin (Química cristalógrafa)”

- Charla: “Las mujeres científicas de hoy y en tu barrio”

- Debate: “¿Qué dicen las encuestas sobre las carreras que escogen chicos y chicas?, ¿Te atreves a ser científica?”

IES Francisco de Quevedo, Madrid

19th of February 2019

Material digital audiovisual:

- Prof Jon Marangos- VIII Colloquium Marie Skłodowska Curie - Coloquio Curie-. 15th of March 2019<https://www.youtube.com/watch?v=Lveo8Tb44I&t=230s>- Profa. María García Parajo- X Colloquium Marie Skłodowska Curie -Coloquio Curie- 18th of June 2019<https://www.youtube.com/watch?v=XDI2SHxRdLM&t=543s>- Prof. Mariano Barbacid- XI Colloquium Marie Skłodowska Curie -Coloquio Curie- 14th of October 2019<https://www.youtube.com/watch?v=Vqb9wzVV-gk&t=2s>

Programa Educativo 4º ESO+Empresa de la Comunidad de Madrid

- Organizadora del evento

Colegio Villa de Navalcarnero, Madrid, Spain

8th-10th of April 2019

Coloquios "Marie Skłodowska Curie"

- Co-organizadora de la 3^a edición (2019-2020) del ciclo de conferencias e impartición de charlas

11th of October 2019 – 30th of June 2020

Semana de la Ciencia del CEIP "Juan de Zaragüeta"

- Taller "¿De qué material me construiría una casa?"

CEIP Juan de Zaragüeta, Madrid (Spain)

12th June 2019

XIX Semana de la Ciencia-CSIC-CAM

- Taller "De que material me construiría una casa?", Madrid, Spain, 12th of November, 2019

- Taller "La Química del yeso", IES Centro Cultural Salmantino, Madrid (Spain), 12th of November 2019

- Taller "La Química del yeso", IES Ana M^a Matute, Velilla de San Antonio, Madrid, 13th of November 2019

- Escape room "Del Cosmos al nano...y más allá", 15th of November 2019

D+i VII Jornadas de Divulgación Innovadora "Querer la luna...para empezar"

- Taller "¿De qué material me construiría una casa?", Zaragoza, 30th of November 2019

- Taller "Si soplán, ¿se me caerá la casa?" Zaragoza, 30th of November 2019

Jose Antonio Briz Monago*Programa Educativo 4º ESO+Empresa*

- Colaboración con centros educativos, Comunidad de Madrid

Visitas guiadas a los laboratorios del IEM

8th-10th of April 2019

Diego Romero Abujetas*Grupo TeatRIEM (grupo de teatro del Instituto de Estructura de la Materia)*

- Actor in "A ciencia cierta" (Montaje y Dramaturgia: J. Vicente García-Ramos)

Scientific theater - TeatRIEM

Museo de la Ciencia, Valladolid (Spain)

9th of March 2019

Talleres de divulgación: "Ciudad Ciencia"

- Taller "Descubriendo la luz"

Jumilla (Murcia), Spain, 22nd of March 2019

5.4.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS**José M. Fernández Sánchez***Espectroscopía: una potente herramienta para conocer el Universo*

Conferencia divulgativa – Semana de la Ciencia

Instituto de Estructura de la Materia CSIC, Madrid

11th of November 2019

Guzmán Tejeda Gala y Vicente Timón Salinero*Experimentamos con nuestros sentidos*

Taller de experimentos caseros dirigidos a estudiantes de 5º y 6º de primaria – Semana de la Ciencia

Ámbito regional de la Comunidad de Madrid

November 2019

Vicente Timón Salinero*¿Qué papel juegan las arcillas en el Universo?*

Conferencia divulgativa – Semana de la Ciencia

Instituto de Estructura de la Materia CSIC, Madrid

14th of November 2019

Belén Maté Naya, Guzmán Tejeda Gala, Vicente Timón Salinero, Miguel Ángel Moreno Alba y Ángel Luis González Valdenebro

Escape Room “*Del Cosmos al nano ... y más allá*”

Actividad divulgativa dirigida a estudiantes de entre 15 y 18 años de edad

Ámbito: Regional Comunidad de Madrid

5th and 15th of October 2019

5.4.4 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

Tiberio Ezquerro Sanz

Actor in “*La escena de Anaximandro. Encuentros de Teatro y Ciencia*”

Scientific theater - TeatrIEM

Semana de la Ciencia -Museo Nacional de Ciencias Naturales, CSIC. José Abascal 9, Madrid
14th-16th of November 2019

Actor in “*A Ciencia cierta*” (Montaje y Dramaturgia: J. Vicente García-Ramos)

Scientific theater - TeatrIEM

15th of February 2019. Centro Cívico Viña Grande, Alcorcón, Madrid

24th of February 2019. Residencia de Estudiantes, Madrid

9th of March 2019. Museo de la Ciencia, Valladolid

26th of April 2019. Instituto de Enseñanza Secundaria Margarita Salas, Majadahonda, Madrid

Javier Martínez de Salazar Bascuñana

La vocación del científico: un enfoque de la psicología

Conferencia divulgativa - Semana de la Ciencia

Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, Madrid

14th of November 2019

Aurora Nogales Ruiz

Charla: Grandes mujeres científicas: Rita Levi-Montalcini y Rosalind Franklin. Debate: Las mujeres científicas de hoy. ¿Qué dicen las encuestas sobre las carreras que escogen chicos y chicas? ¿Te atreves a ser científica?

Colaboración con el instituto de enseñanza secundaria IES Francisco de Quevedo, Madrid

19th of February 2019

Escape Room: “*Del Cosmos al Nano... y más allá*”

Semana de la Ciencia. Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, Madrid

15th of November 2019

Araceli Flores Aguilar-Amat

“*Los plásticos de nuestra vida diaria*”

Actividad enmarcada en el Programa de Conferencia Científicas del CSIC dirigidas al sistema educativo de la Comunidad de Madrid

CEIP Laura García Noblejas

Villacosa de Odón

16th of December 2019

Taller “*Los polímeros que nos rodean*”

Colegio Menesiano

Madrid

10th -13th of May 2019

Escape Room “*Del Cosmos al nano ... y más allá*”

Actividad divulgativa dirigida a estudiantes de entre 15 y 18 años de edad

Semana de la Ciencia y la Tecnología. Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, Madrid

15th of November 2019

Mari Cruz García Gutiérrez

Playwright, actress and assistant director in “*La escena de Anaximandro. Encuentros de Teatro y Ciencia*”

Scientific theater - TeatrIEM

Semana de la Ciencia -Museo Nacional

de Ciencias Naturales, CSIC. José Abascal 9, Madrid

14-16th of November 2019

Actress in "A Ciencia cierta" (Montaje y Dramaturgia: J. Vicente García-Ramos)
 Scientific theater - TeatrIEM
 15th of February 2019. Centro Cívico Viña Grande, Alcorcón, Madrid
 24th of February 2019. Residencia de Estudiantes, Madrid
 9th of March 2019. Museo de la Ciencia, Valladolid
 26th of April 2019. Instituto de Enseñanza Secundaria Margarita Salas, Majadahonda, Madrid

Juan Francisco Vega Borrego

Programa 4ºESO+Empresas de la Comunidad de Madrid
 Laboratorios del grupo BIOPHYM
 8th of April 2019

Virginia Souza-Egipsy

Programa 4ºESO+Empresas de la Comunidad de Madrid
 Microscopía Electrónica de Transmisión. Preparación de muestras y observación
 8th of April 2019

5.5 TRANSFERENCIA DE TECNOLOGÍA *TRANSFER OF TECHNOLOGY*

5.5.2 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: Safra Photonics Ltd.
 Place: Kosice, Slovak Republic.
 Date: 27th-31st of May, 23th of August - 6th of September 2019

Meeting attendees: Santiago Sánchez Cortés.
 Collaboration: Safra Photonics Ltd.
 Place: Videoconference.
 Date: During all the 2019 year, twice a month

➤ MIEMBROS DE COMITÉS CIENTÍFICOS ASESORES

Member: Santiago Sánchez Cortés.
 Collaboration: Regulaxis SAS Company.
 Place: Technological Park in Paris, France.
 Date: 2019

Member: Santiago Sánchez Cortés.
 Collaboration: Safra Photonics Ltd.
 Place: Kosice, Slovak Republic.
 Date: 2019

5.5.4 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

➤ REUNIONES DE TRANSFERENCIA DE TECNOLOGÍA

Título de la reunión: Jornada técnica DOW-IEM
 Meeting attendees: J. Martínez-Salazar, J.F. Vega, J. Ramos and V. Souza-Egipsy
 Collaboration: Dow Chemical Ibérica
 Place: IEM-CSIC (Madrid)
 Date: 4th of February 2019

Título de la reunión: Cómo emprender desde el laboratorio

Meeting attendees: Aurora Nogales

Collaboration: Vicepresidencia Adjunta de Transferencia del Conocimiento, CSIC

Place: Madrid

Date: 9th April 2019

Título de la reunión: Jornada técnica DOW-IEM

Meeting attendees: J. Martínez-Salazar and J.F. Vega

Collaboration: Dow Chemical Ibérica

Place: Dow Research Centre (Tarragona)

Date: 27th and 28th of May 2019

Título de la reunión: Jornada técnica DOW-IEM

Meeting attendees: J. Martínez-Salazar, J.F. Vega, J. Ramos and V. Souza-Egipsy

Collaboration: Dow Chemical Ibérica

Place: IEM-CSIC (Madrid)

Date: 15th of July 2019

Título de la reunión: 3D-QSAR and PE characterization topics

Meeting attendees: V. Cruz, J. Martínez-Salazar and J. Ramos

Collaboration: Total RC/R&D Polymers

Place: via skype

Date: 21st of June 2019

Título de la reunión: 3D-QSAR and PE characterization topics

Meeting attendees: V. Cruz and J.F. Vega

Collaboration: Total RC/R&D Polymers

Place: Sede de Total en Seneffe (Bélgica)

Date: 21st of November 2019

Informes de transferencia tecnológica

There have been the corresponding confidential reports in order to cover the objectives of the project

There have been other technical contacts through various communications channels

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 Teorías de Campos y Física Estadística, Instituto Universitario Gregorio Millán Barbany*, University of Carlos III de 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), M^a José Gacía Borge and Olof Tengblad.

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

Unidades Asociadas / Associated Units:

- **M^a 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:

Olof Tengblad

(Visita a centros internacionales)

- ISOLDE, CERN, Geneva, Switzerland, 21th- 23rd of January 2019
- GSI, Darmstadt, Germany Exp. S454, 2nd- 6th of April of 2019
- ISOLDE, CERN, Geneva, Switzerland, 6th- 9th of April 2019

Sagrario Martínez Ramírez

- Member of the *Comité Técnico de Normalización CTN80: Subcomité STN05/CTN-80. Cales*
- Member of the *Comité Técnico de Normalización CTN80. Cementos y cales*
- Member of the *Technical Committee RILEM TC-277-LHS: Specifications for testing and evaluation of lime-based materials for historic structures*

5.6.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS

Unidades Asociadas / Associated Units:

- *Molecular Physical Chemistry*, comprising IEM-CSIC, IQFR-CSIC, IFF-CSIC and Department Química Física I, Universidad Complutense de Madrid.
Responsible: F. Javier Aoiz.
Members of the IEM participating in this Associated Unit:
Víctor J. Herrero Ruiz de Loizaga (responsible).

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

Mari Cruz García Gutiérrez

- Measurements in ALBA Syncrhotron, (NCD beamline). Barcelona, Spain, 14th-18th March 2019

Aurora Nogales Ruiz

- Measurements in Trieste Syncrhotron, (SAXS beamline). Bazzovizza, Italy, 24-25th January 2019
- Measurements in ALBA Syncrhotron, (NCD beamline). Barcelona, Spain, 14-17th March 2019
- Measurements in ALBA Syncrhotron, (NCD beamline). Barcelona, Spain, 6-12th May 2019
- Measurements in ALBA Syncrhotron, (NCD beamline). Barcelona, Spain, 11-14th June 2019
- Measurements in ALBA Syncrhotron, (NCD beamline). Barcelona, Spain, 17-18th September 2019

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. Emilio Alvarez Navarro, Bogar Díaz, Miguel Ángel García-Ariza and J. E Ramírez.
Effects of the second virial coefficient on the adiabatic lapse rate of dry atmospheres.
European Physical Journal Plus **134**, 458 (2019).
2. Y. Baba, A. Díaz-Fernández, E. Díaz, F. Domínguez-Adame, and R.A. Molina.
Electric field manipulation of surface states in topological semimetals. Physical Review B **100**, 165105 (2019).
3. J. Fernando Barbero G., Bogar Díaz, Juan Margalef-Bentabol and Eduardo J. S. Villaseñor.
Dirac's algorithm in the presence of boundaries: a practical guide to a geometric approach.
Classical and Quantum Gravity **36**, 205014 (2019).
4. J. Fernando Barbero G., Bogar Díaz, Juan Margalef-Bentabol and Eduardo J. S. Villaseñor.
Generalizations of the Pontryagin and Husain-Kuchar actions to manifolds with boundary.
Journal of High Energy Physics **10**, 121 (2019).
5. C. Barceló, V. Boyanov, R. Carballo-Rubio, and L.J. Garay.
Semiclassical gravity effects near horizon formation.
Classical and Quantum Gravity **36**, 165004 (2019).
6. Enis Belgacem, Gianluca Calcagni, *et al.* [LISA Cosmology Working Group].
Testing modified gravity at cosmological distances with LISA standard sirens.
Journal of Cosmology and Astroparticle Physics **1907**, 024 (2019).
7. E. Benito-Matías and R.A. Molina.
Surface states in topological semimetal slab geometries.
Physical Review B **99**, 075034 (2019).
8. S. C. Bennedja, D. Hammoutène, and M.L. Senent.
Theoretical characterization of C₃H and C₅H and their anions.
The Astrophysical Journal **871**, 255 (2019).
9. Fabio Briscese, Gianluca Calcagni, and Leonardo Modesto.
Nonlinear stability in nonlocal gravity.
Physical Review D **99**, 084041 (2019).
10. Gianluca Calcagni.
Multifractional spacetimes from the Standard Model to cosmology.
International Journal of Geometric Methods in Modern Physics **16**, 1940004 (2019).
11. Gianluca Calcagni, Leonardo Modesto, and Giuseppe Nardelli.
Non-perturbative spectrum of non-local gravity.
Physics Letters B **795**, 391 (2019).
12. Gianluca Calcagni, Sachiko Kuroyanagi, Sylvain Marsat, Mairi Sakellariadou, Nicola Tamanini, and Gianmassimo Tasinato.
Gravitational-wave luminosity distance in quantum gravity.
Physics Letters B **798**, 135000 (2019).
13. Gianluca Calcagni, Sachiko Kuroyanagi, Sylvain Marsat, Mairi Sakellariadou, Nicola Tamanini, and Gianmassimo Tasinato.
Quantum gravity and gravitational-wave astronomy.
Journal of Cosmology and Astroparticle Physics **1910**, 012 (2019).
14. R. Carballo-Rubio, L.J. Garay, E. Martín-Martínez, and J. de Ramón.
The Unruh effect without thermality.
Physical Review Letters **123**, 041601 (2019).

15. D. V. Chicharro, S. M. Poullain, A. Zanchet, A. Bouallagui, A. García-Vela, M. L. Senent, L. Rubio-Lago, and L. Bañares.
Site-specific hydrogen-atom elimination in photoexcited ethyl radical.
Chemical Science **10**, 6494 (2019).
16. S. Dalbouha and M.L. Senent.
Large amplitude vibrations of acetyl isocyanate, methyl cyanoformate, and acetyl cyanate.
Physical Chemistry Chemical Physics **21**, 3597 (2019).
17. J. Dukelsky, J. E. Garcia-Ramos, J. M. Arias and P. Perez-Fernández.
Number conserving particle-hole RPA for superfluid nuclei.
Physics Letters B **795**, 537 (2019).
18. Beatriz Elizaga Navascués, Guillermo A. Mena Marugán and Santiago Prado.
Fock quantization of the Dirac field in Hybrid Quantum Cosmology: Relation with adiabatic states.
Physical Review D **100**, 125003 (2019).
19. Beatriz Elizaga Navascués, Guillermo A. Mena Marugán and Santiago Prado.
Asymptotic Diagonalization of the Fermionic Hamiltonian in Hybrid Loop Quantum Cosmology.
Physical Review D **99**, 063535 (2019).
20. Beatriz Elizaga Navascués, Guillermo A. Mena Marugán and Thomas Thiemann.
Hamiltonian Diagonalization in Hybrid Loop Quantum Cosmology.
Classical Quantum Gravity **36**, 18 (2019).
21. V. Gámez, M.L. Senent, M. Carvajal and A. Galano.
Competitive gas phase reactions for the production of isomers C₂O₂H₄. Spectroscopic constants of methyl formate.
Journal of Physical Chemistry **123**, 9658 (2019).
22. Alejandro García-Quismondo and Guillermo A. Mena Marugán.
The MMO prescription for the Dapor-Liegener model of Loop Quantum Cosmology.
Physical Review D **99**, 083505 (2019).
23. J. E. Garcia-Ramos, J. Dukelsky, P. Perez-Fernandez, and J. M. Arias.
An extended Agassi model: algebraic structure, phase diagram, and large size limit.
Physica Scripta **94**, 044003 (2019).
24. E. Garrido and A.S. Jensen.
Confinement of two-body systems and calculations in d dimensions.
Physical Review Research **1**, 023009 (2019).
25. E. Garrido, A.S. Jensen, and R. Álvarez-Rodríguez.
Few-body quantum method in a d-dimensional space.
Physics Letters A **383**, 2021 (2019).
26. E. Garrido and A.S. Jensen.
⁴²Ca and ⁵⁰Ca with the (Many- and Few-Body) Unified Method.
Few-body Systems **60**, 45 (2019).
27. J. González and T. Stauber.
Kohn-Luttinger superconductivity in twisted bilayer graphene.
Physical Review Letters **122**, 026801 (2019).
28. B. Kerkeni, V. Gámez, M. L. Senent, and N. Feautrier.
Understanding propyl-cyanide and its isomers formation: ab initio study of the spectroscopy and reaction kinetics.
Physical Chemistry Chemical Physics **21**, 23375 (2019).

29. S. Lerma-Hernández, J. Dukelsky, and G. Ortiz.
Integrable model of a p-wave bosonic superfluid.
Physical Review Research **1**, 032021(R) (2019).
30. A. Rubio-García, J. Dukelsky, D. R. Alcoba, P. Capuzzi, B. Ona, E. Ríos, A. Torre, and L. Lain.
Variational reduced density matrix method in the doubly-occupied configuration interaction space using four-particle N-representability conditions: Application to the XXZ model of quantum magnetism.
Journal of Chemical Physics **151**, 154104 (2019).
31. P. Sarriguren, D. Merino, O. Moreno, E. Moya de Guerra, D.N. Kadrev, A.N. Antonov, M.K. Gaidarov.
Elastic magnetic electron scattering from deformed nuclei.
Physical Review C **99**, 034325 (2019).
32. P. Sarriguren.
Microscopic calculations of weak decays in superheavy nuclei.
Physical Review C **100**, 014309 (2019).
33. P. Sarriguren.
Mean-field calculations of charge radii in ground and isomeric states of Cd isotopes.
Physical Review C **100**, 054306 (2019).
34. M.L. Senent, F. Dayou, F. Dummouchel, C. Balança, and N. Feautrier.
Inelastic rate coefficients for collisions of C_4H^- with para- H_2 ($j = 0$) at low temperatures.
MNRAS **486**, 422 (2019).
35. O. Yazidi, M.L. Senent, V. Gámez, M. Carvajal, and M. Mogren Al-Mogren.
Ab initio spectroscopic characterization of the radical CH_3-O-CH_2 at low temperatures.
Journal of Chemical Physics **150**, 194102 (2019).

PUBLICACIONES CONJUNTAS CON EL DEPARTAMENTO DE ENVYMED**PUBLICATIONS IN COMMON WITH ENVYMED DEPARTMENT**

36. V. Guadilla, A. Algorta, J.L. Tain, J. Agramunt, J. Aysto, J.A. Briz, A. Cucoanes, T. Eronen, M. Estienne, M. Fallot, L. M. Fraile, E. Ganioglu, W. Gelletly, D. Gorelov, J. Hakala, A. Jokinen, D. Jordan, A. Kankainen, V. Kolhinen, J. Koponen, M. Lebois, L. Le Meur, T. Martinez, M. Monserrate, A. Montaner-Piza, I. Moore, E. Nacher, S. E. A. Orrigo, H. Penttila, I. Pohjalainen, A. Porta, J. Reiniikainen, M. Reponen, S. Rinta-Antila, B. Rubio, K. Rytkonen, P. Sarriguren, T. Shiba, V. Sonnenschein, A. A. Sonzogni, E. Valencia, V. Vedia, A. Voss, J.N. Wilson, and A.-A. Zakari-Issoufou.
Total absorption gamma-ray spectroscopy of niobium isomers.
Physical Review C **100**, 024311 (2019).

PUBLICACIONES CONJUNTAS CON EL DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR**PUBLICATIONS IN COMMON WITH THE MOLECULAR PHYSICS DEPARTMENT**

37. N.E.H. Bensiradj, V. Timón, R. Boussassi, S. Dalbouha, and M.L. Senent.
DFT studies of single and multiple molecular adsorption of CH_4 , SF_6 and H_2O in Zeolitic- Imidazolate Framework (ZIF₄ and ZIF₆).
Inorganica Chimica Acta **490**, 272 (2019).
38. J.M. Fernández, G. Tejeda, M. Carvajal and M.L. Senent.
New spectral characterization of dimethyl ether Isotopologues CH_3OCH_3 and $^{13}CH_3OCH_3$ in the THz region.
The Astrophysical Journal Supplement Series **241**, 13 (2019).

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

39. D. R. Abujetas, A. Barreda, F. Moreno, J. J. Sáenz, A. Litman, J.-M. Geffrin, and J. A. Sánchez-Gil.
Brewster quasi bound states in the continuum in all-dielectric metasurfaces from single magnetic-dipole resonance meta-atoms.
Scientific Reports **9**, 16048 (2019).

40. D. R. Abujetas, J. Feist, F. J. García-Vidal, J. Gómez Rivas, J. A. Sánchez-Gil.
Strong coupling between weakly guided semiconductor nanowire modes and an organic dye.
Physical Review B **99**, 205409 (2019).
41. D. R. Abujetas, J. J. Sáenz, and J. A. Sánchez-Gil.
Narrow Fano resonances in Si nanocylinder metasurfaces: refractive index sensing.
Journal of Applied Physics **125**, 183103 (2019).
42. D. R. Abujetas, N. van Hoof, S. ter Huurne, J. Gómez Rivas, and J. A. Sánchez-Gil.
Spectral and temporal evidence of robust photonic bound states in the continuum on terahertz metasurfaces.
Óptica **6**, 996-1001 (2019).
43. J. Ballof, C. Seiffert, B. Crepieux, C.E. Düllmann, M. Delonca, M. Gai, A. Gottberg, T. Kröll, R. Lica, M. Madurga Flores, Y. Martinez Palenzuela, T.M. Mendonca, M. Owen, J.P. Ramos, S. Rothe, T. Stora, O. Tengblad and F. Wienholtz.
Radioactive boron beams produced by isotope online mass separation at CERN-ISOLDE
European Physical Journal A **55** (5), 65 (2019)
44. T.A. Berry, Z. Podolyák, R.J. Carroll, R. Lică, H. Grawe, N.K. Timofeyuk, T. Alexander, A.N. Andreyev, S. Ansari, M.J.G. Borge, J. Creswell, C. Fahlander, L.M. Fraile, H.O.U. Fynbo, W. Gelletly, R.B. Gerst, M. M. Górska, A. Gredley, P. Greenlees, L.J. Harkness-Brennan, M. Huyse, S.M. Judge, D.S. Judson, J. Konki, J. Kurcewicz, I. Kuti, S. Lalkovski, I. Lazarus, M. Lund, M. Madurga, N. Mărginean, R. Mărginean, I. Marroquin, C. Mihai, R.E. Mihai, E. Nácher, S. Nae, A. Negret, C. Niță, R.D. Page, S. Pascu, Z. Patel, A. Perea, V. Pucknell, P. Rahkila, E. Rapisarda, P.H. Regan, F. Rotaru, C.M. Shand, O. Tengblad and V. Vedia.
Investigation of the Δn=0 selection rule in Gamow-Teller transitions: The β-decay of ²⁰⁷Hg.
Physics Letters, Section B: Nuclear, Elementary Particle and High-Energy Physics **793**, 271-275 (2019).
45. S. Biswas, A. Lemasson, M. Rejmund, A. Navin, Y. H. Kim, C. Michelagnoli, I. Stefan, R. Banik, P. Bednarczyk, S. Bhattacharya, S. Bhattacharyya, E. Clément, H. L. Crawford, G. de France, P. Fallon, G. Frémont, J. Goupil, B. Jacquot, H. J. Li, J. Ljungvall, A. Maj, L. Ménager, V. Morel, R. Palit, R. M. Pérez-Vidal, J. Ropert, D. Barrientos, G. Benzoni, B. Birkenbach, A. J. Boston, H. C. Boston, B. Cederwall, J. Collado, D. M. Cullen, P. Désesquelles, C. Domingo-Pardo, J. Dudouet, J. Eberth, V. González, L. J. Harkness-Brennan, H. Hess, A. Jungclaus, W. Korten, M. Labiche, A. Lefevre, R. Menegazzo, D. Mengoni, B. Million, D. R. Napoli, A. Pullia, B. Quintana, D. Ralet, F. Recchia, P. Reiter, F. Saillant, M. D. Salsac, E. Sanchis, O. Stezowski, Ch. Theisen, J. J. Valiente-Dobón and M. Zielinska.
Effects of one valence proton on seniority and angular momentum of neutrons in neutron-rich ¹²²-¹³¹₅₁Sb isotopes.
Physical Review C **99**, 064302 (2019).
46. M. Blanco-Formoso, A. Sousa-Castillo, X. Xiao, A. Mariño-Lopez, M. Turino, N. Pazos-Perez, V. Giannini, M. A. Correa-Duarte, and R. A. Alvarez-Puebla.
Boosting the analytical properties of gold nanostars by single particle confinement into yolk porous silica shells.
Nanoscale **11** (45), 21872-21879 (2019).
47. P.A. Butler, L.P. Gaffney, P. Spagnoletti, J. Konki, M. Scheck, J.F. Smith, K. Abrahams, M. Bowry, J. Cederkäll, T. Chupp, G. de Angelis, H. De Witte, P.E. Garrett, A. Goldkuhle, C. Henrich, A. Illana, K. Johnston, D.T. Joss, J.M. Keatings, N.A. Kelly, M. Komorowska, T. Kröll, M. Lozano, B.S. Nara Singh, D. O'Donnell, J. Ojala, R.D. Page, L.G. Pedersen, C. Raison, P. Reiter, J.A. Rodriguez, D. Rosiak, S. Rothe, T.M. Shneidman, B. Siebeck, M. Seidlitz, J. Sinclair, M. Stryjczyk, P. Van Duppen, S. Vinals, V. Virtanen, N. Warr, K. Wrzosek-Lipska and M. Zielinska.
The observation of vibrating pear-shapes in radon nuclei.
Nature Communications **10** (1), 2473 (2019).
48. C. Cabrillo, F. Barroso-Bujans, S. Cerveny, R. Fernández-Perea, F. Fernandez-Alonso, D. Bowron and F. J. Bermejo.
Two-dimensional ordering in 1-propanol-graphite-oxide intercalates: isotopic effects.
Molecular Physics **117**, 3434-3444 (2019).
49. M.V. Cañamares, F. Pozzi and J.R. Lombardi.
Raman, SERS, and DFT Analysis of the Main Alkaloids Contained in Syrian Rue.
Journal of Physical Chemistry C **123** (14), 9262-9271 (2019).

50. S. Chen, J. Lee, P. Doornenbal, A. Obertelli, C. Barbieri, Y. Chazono, P. Navrátil, K. Ogata, T. Otsuka, F. Raimondi, V. Somà, Y. Utsuno, K. Yoshida, H. Baba, F. Browne, D. Calvet, F. Château, N. Chiga, A. Corsi, M. L. Cortés, A. Delbart, J.-M. Gheller, A. Giganon, A. Gillibert, C. Hilaire, T. Isobe, J. Kahbow, T. Kobayashi, Y. Kubota, V. Lapoux, H. N. Liu, T. Motobayashi, I. Murray, H. Otsu, V. Panin, N. Paul, W. Rodriguez, H. Sakurai, M. Sasano, D. Steppenbeck, L. Stuhl, Y. L. Sun, Y. Togano, T. Uesaka, K. Wimmer, K. Yoneda, N. Achouri, O. Aktas, T. Aumann, L. X. Chung, F. Flavigny, S. Franchoo, I. Gašparić, R.-B. Gerst, J. Gibelin, K. I. Hahn, D. Kim, T. Koiwai, Y. Kondo, P. Koseoglou, C. Lehr, B. D. Linh, T. Lokotko, M. MacCormick, K. Moschner, T. Nakamura, S. Y. Park, D. Rossi, E. Sahin, D. Sohler, P.-A. Söderström, S. Takeuchi, H. Törnqvist, V. Vaquero, V. Wagner, S. Wang, V. Werner, X. Xu, H. Yamada, D. Yan, Z. Yang, M. Yasuda and L. Zanetti.
Quasifree Neutron Knockout from ^{54}Ca Corroborates Arising $N = 34$ Neutron Magic Number.
Physical Review Letters **123**, 142501 (2019).
51. Z. Q. Chen, Z. H. Li, H. Hua, H. Watanabe, C. X. Yuan, S. Q. Zhang, G. Lorusso, S. Nishimura, H. Baba, F. Browne, G. Benzoni, K. Y. Chae, F. C. L. Crespi, P. Doornenbal, N. Fukuda, G. Gey, R. Gernhäuser, N. Inabe, T. Isobe, D. X. Jiang, A. Jungclaus, H. S. Jung, Y. Jin, D. Kameda, G. D. Kim, Y. K. Kim, I. Kojouharov, F. G. Kondev, T. Kubo, N. Kurz, Y. K. Kwon, X. Q. Li, J. L. Lou, G. J. Lane, C. G. Li, D. W. Luo, A. Montaner-Pizá, K. Moschner, C. Y. Niu, F. Naqvi, M. Niikura, H. Nishibata, A. Odahara, R. Orlandi, Z. Patel, Zs. Podolyák, T. Sumikama, P.-A. Söderström, H. Sakurai, H. Schaffner, G. S. Simpson, K. Steiger, H. Suzuki, J. Taprogge, H. Takeda, Zs. Vajta, H. K. Wang, J. Wu, A. Wendt, C. G. Wang, H. Y. Wu, X. Wang, C. G. Wu, C. Xu, Z. Y. Xu, A. Yagi, Y. L. Ye, and K. Yoshinaga.
Proton Shell Evolution below ^{132}Sn : First Measurement of Low-Lying β -Emitting Isomers in $^{123,125}\text{Ag}$.
Physical Review Letters **122**, 212502 (2019).
52. P. J. Davies, J. Park, H. Grawe, R. Wadsworth, R. Gernhäuser, R. Krücken, F. Nowacki, D. S. Ahn, F. Ameil, H. Baba, T. Bäck, B. Blank, A. Blazhev, P. Boutachkov, F. Browne, I. Čeliković, M. Dewald, P. Doornenbal, T. Faestermann, Y. Fang, G. de France, N. Fukuda, A. Gengelbach, J. Gerl, J. Giovinazzo, S. Go, N. Goel, M. Górska, E. Gregor, H. Hotaka, S. Ilieva, N. Inabe, T. Isobe, D. G. Jenkins, J. Jolie, H. S. Jung, A. Jungclaus, D. Kameda, G. D. Kim, Y.-K. Kim, I. Kojouharov, T. Kubo, N. Kurz, M. Lewitowicz, G. Lorusso, D. Lubos, L. Maier, E. Merchan, K. Moschner, D. Murai, F. Naqvi, H. Nishibata, D. Nishimura, S. Nishimura, I. Nishizuka, Z. Patel, N. Pietralla, M. M. Rajabali, S. Rice, H. Sakurai, H. Schaffner, ... et al.
Toward the limit of nuclear binding on the $N = Z$ line: Spectroscopy of ^{96}Cd .
Physical Review C **99**, 021302(R) (2019).
53. F. Delaunay, N. L. Achouri, A. Algora, M. Assié, J. Balibrea, K. Banerjee, C. Bhattacharya, M. J. G. Borge, D. Cano-Ott, B. Fernández-Dominguez, L. M. Fraile, J. Gibelin, M. V. Lund, M. Madurga, F. M. Marqués, I. Marroquin, T. Martinez, E. Mendoza, N. A. Orr, M. Pärlog, X. Pereira-López, V. Pestel, K. Riisager, C. Santos, M. Sénoville, O. Tengblad and V. Vedia.
Study of multi-neutron emission in the β -decay of ^{11}Li .
Il Nuovo Cimento della Societa Italiana di Fisica C **42**, 58 (2019).
54. A. Di Pietro, J.P. Fernández-García, P. Figuera, M. Fisichella, S. Heinitz, M. Lattuada, D. Torresi, M. Alcorta, M.J.G. Borge, T. Davinson, A.M. Laird, A.C. Shotter, D. Shumann, N. Soic, O. Tengblad and M. Zadro
Exotic clustering investigation in ^{13}B and ^{14}C using RIBs.
Nuovo Cimento della Societa Italiana di Fisica C **41**(5), 186 (2019).
55. F. Dirnberger, D. R. Abujetas, J. König, M. Forsch, T. Koller, I. Gronwald, C. Lange, R. Huber, C. Schüller, T. Korn, J. A. Sánchez-Gil, and D. Bougeard.
Tuning Spontaneous Emission through Waveguide Cavity Effects in Semiconductor Nanowires.
Nano Letters **19**, 7287-7292 (2019).
56. A. Ertani, S. Nardi, O. Francioso, S. Sanchez-Cortes, M. Di Foggia and M. Schiavon.
*Effects of Two Protein Hydrolysates Obtained from Chickpea (*Cicer arietinum L.*) and *Spirulina platensis* on *Zea mays (L.)* Plants.*
Frontiers in Plant Science **10**, 954 (2019).
57. M. Estienne, M. Fallot, L. Giot, V. Guadilla-Gomez, L. Le Meur, A. Porta, A. Algora, J.L. Tain, J.A. Briz, J. Agramunt, J. Aysto, S. Cormon, A. Cucoanes, T. Eronen, L.M. Fraile, E. Ganoglu, W. Gelletly, D. Gorelov, J. Hakala, A. Jokinen, M.D. Jordan, A. Kankainen, V.S. Kolhinen, J. Koponen, M. Lebois, T. Martínez, M. Monserrate, A. Montaner-Piza, I. Moore, E. Nacher, ... et al.
Summation Calculations for Reactor Antineutrino Spectra, Decay Heat and Delayed Neutron Fractions Involving New TAGS Data and Evaluated Databases.
EPJ Web of Conferences **211**, 01001 (2019).

58. A. D. Fovo, M. Oujja, M. Sanz, A. Martínez-Hernández, M.V. Cañamares, M. Castillejo and R. Fontana.
Multianalytical non-invasive characterization of phthalocyanine acrylic paints through spectroscopic and non-linear optical techniques.
Spectrochimica Acta - Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy **208**, 262-270 (2019).
59. O. Francioso, E. López-Tobar, A. Torreggiani, M. Iriarte and S. Sánchez-Cortés.
Stimulated Adsorption of Humic Acids on Capped Plasmonic Ag Nanoparticles Investigated by Surface-Enhanced Optical Techniques.
Langmuir **35** (13), 4518- 4526 (2019).
60. Y. Fuentes-Edfuf, J. A. Sánchez-Gil, C. Florian, V. Giannini, J. Solis, and J. Siegel.
Surface plasmon polaritons on rough metal surfaces: Role in the formation of laser induced periodic surface structures in metals.
ACS Omega **4** (4), 6939–6946 (2019).
61. Y. Fuentes-Edfuf, J.A. Sánchez-Gil, M. García-Pardo, R. Serna, G.D. Tsibidis, V. Giannini, J. Solis, J. Siegel.
Tuning the period of femtosecond laser induced surface structures in steel: From angled incidence to quill writing.
Applied Surface Science **493**, 948-955 (2019).
62. V. Guadilla, A. Algara, J. L. Tain, M. Estienne, M. Fallot, A. A. Sonzogni, J. Agramunt, J. Åystö, J. A. Briz, A. Cucoanes, T. Eronen, L. M. Fraile, E. Ganioğlu, W. Gelletly, D. Gorelov, J. Hakala, A. Jokinen, D. Jordan, A. Kankainen, V. Kolhinien, J. Koponen, M. Lebois, L. Le Meur, T. Martínez, M. Monserrate, A. Montaner-Pizá, I. Moore, E. Nácher, S.E.A. Orrigo, H. Penttilä, I. Pohjalainen, A. Porta, J. Reinikainen, M. Reponen, S. Rinta-Antila, B. Rubio, K. Rytkönen, T. Shiba, V. Sonnenschein, E. Valencia, V. Vedia, A. Voss, J. N. Wilson, and A.-A. Zakari-Issoufou.
Large Impact of the Decay of Niobium Isomers on the Reactor ν^-_e Summation Calculations.
Physical Review Letters **122**, 042502 (2019).
63. V. Guadilla, J.L. Tain, A. Algara, J. Agramunt, D. Jordan, M. Monserrate, A. Montaner-Piza, E. Nácher, S.E. Orrigo, B. Rubio, E. Valencia, M. Estienne, M. Fallot, L. Le Meur, J.A. Briz, A. Cucoanes, A. Porta, T. Shiba, A.A. Zakari-Issoufou, A.A. Sonzogni, J. Aysto, T. Eronen, ... et al.
Total absorption gamma-ray spectroscopy of the beta-delayed neutron emitters I-137 and Rb-95
Physical Review C **100**(4), 044305 (2019).
64. G. Häfner, K. Moschner, A. Blazhev, P. Boutachkov, P.J. Davies, R. Wadsworth, F. Ameil, H. Baba, T. Bäck, M. Dewald, P. Doornenbal, T. Faestermann, A. Gengelbach, J. Gerl, R. Gernhäuser, S. Go, M. Górska, H. Grawe, E. Gregor, H. Hotaka, T. Isobe, D.G. Jenkins, J. Jolie, H.S. Jung, I. Kojouharov, N. Kurz, M. Lewitowicz, G. Lorusso, R. Lozeva, E. Merchan, F. Naqvi, H. Nishibata, D. Nishimura, S. Nishimura, N. Pietralla, H. Schaffner, P.A. Söderström, K. Steiger, T. Sumikama, J. Taprogge, P. Thöle, H. Watanbe, N. Warr, V. Werner, Z.Y. Xu, A. Yagi, K. Yoshinaga, and Y. Zhu.
Properties of γ-decaying isomers in the Sn 100 region populated in fragmentation of a Xe 124 beam.
Physical Review C **100**(2) 024302 (2019).
65. G. Häfner, K. Moschner, A. Blazhev, P. Boutachkov, P.J. Davies, R. Wadsworth, F. Ameil, H. Baba, T. Bäck, M. Dewald, P. Doornenbal, T. Faestermann, A. Gengelbach, J. Gerl, R. Gernhäuser, S. Go, M. Górska, H. Grawe, E. Gregor, H. Hotaka, T. Isobe, D.G. Jenkins, J. Jolie, H.S. Jung, I. Kojouharov, N. Kurz, M. Lewitowicz, G. Lorusso, R. Lozeva, E. Merchan, F. Naqvi, H. Nishibata, D. Nishimura, S. Nishimura, N. Pietralla, H. Schaffner, P.A. Söderström, K. Steiger, T. Sumikama, J. Taprogge, P. Thöle, H. Watanbe, N. Warr, V. Werner, Z.Y. Xu, A. Yagi, K. Yoshinaga, and Y. Zhu.
Properties of γ-decaying isomers in the 100 Sn region revisited.
Acta Physica Polonica B **50** 431 (2019).
66. B. Hernández, P. Legrand, S. Dufay, R. Gahoual, S. Sanchez-Cortes, S. G. Kruglik, J. R. Fabreguettes, J. P. Wolf, P. Houzé, M. Ghomi.
Disorder-to-Order Markers of a Cyclic Hexapeptide Inspired from the Binding Site of Fertilin β Involved in Fertilization Process.
ACS Omega **4**(19), 18049-18060 (2019).
67. B. Hernández, S. Sánchez-Cortés, P. Houzé, and M. Ghomi.
Nonenzymatic Hydrolysis of Acetylthiocholine by Silver Nanoparticles.
Journal of Physical Chemistry C **123** (4), 2378-2385 (2019).

68. M. Holl, V. Panin, H. Alvarez-Polf, L. Atar, T. Aumann, S. Beceiro-Novo, J. Benlliure, C.A. Bertulani, J.M. Boillos, K. Boretzky, M. Caamaño, C. Caesar, E. Casarejos, W. Catford, J. Cederkall, L. Chulkov, D. Cortina-Gil, E. Cravo, I. Dillmann, P. Díaz Fernández, Z. Elekes, J. Enders, L.M. Fraile, D. Galaviz Redondo, R. Gernhäuser, P. Golubev, T. Heftrich, M. Heil, M. Heine, A. Heinz, A. Henriques, H.T. Johansson, B. Jonson, N. Kalantar-Nayestanaki, R. Kanungo, A. Kelic-Heil, T. Kröll, N. Kurz, C. Langer, T. Le Bleis, S. Lindberg, J. Machado, E. Nacher, M.A. Najafi, T. Nilsson, C. Nociforo, S. Paschalidis, M. Petri, R. Reifarth, G. Ribeiro, C. Rigollet, D.M. Rossi, D. Savran, H. Scheit, H. Simon, O. Sorlin, I. Syndikus, O. Tengblad, Y. Togano, M. Vandebrouck, P. Velho, F. Wamers, H. Weick, C. Wheldon, G.L. Wilson, J.S. Winfield, P. Woods, M. Zhukov, K. Zuber for the R3B Collaboration.
Quasi-free neutron and proton knockout reactions from light nuclei in a wide neutron-to-proton asymmetry range.
Physics Letters B **795**, 682–688 (2019).
69. E. Imbarack, R. Sánchez-González, J.P. Soto, P. Leyton, I. López-Tocón, J. Soto, S. Sánchez-Cortés, J.C. Otero, M. Campos-Vallette.
Building hot spots in different plasmonic nanoparticles from a cruciform bifunctional dipyridine anthracene.
Journal of Raman Spectroscopy **50** (6), 847-855 (2019).
70. Z. Jurasekova, A. Garcia-Leis, S. Sanchez-Cortes, A. Tinti, A. Torreggiani.
Structural Analysis of the Neuropeptide Substance P by Using Vibrational Spectroscopy.
Analytical and Bioanalytical Chemistry **411**, 7419-7430 (2019).
71. L. Kaya, A. Vogt, P. Reiter, C. Müller-Gatermann, A. Gargano, L. Coraggio, N. Itaco, A. Blazhev, K. Arnswald, D. Bazzacco, B. Birkenbach, A. Bracco, B. Bruyneel, L. Corradi, F. C. L. Crespi, G. de Angelis, M. Droste, J. Eberth, E. Farnea, E. Fioretto, C. Fransen, A. Gadea, A. Giaz, A. Görgen, A. Gottardo, K. Hadynska-Klek, H. Hess, R. Hetzenegger, R. Hirsch, P. R. John, J. Jolie, A. Jungclaus, W. Korten, S. Leoni, L. Lewandowski, S. Lunardi, R. Menegazzo, D. Mengoni, C. Michelagnoli, T. Mijatović, G. Montagnoli, D. Montanari, D. Napoli, Zs. Podolyák, G. Pollarolo, F. Recchia, D. Rosiak, N. Saed-Samii, E. Sahin, M. Siciliano, F. Scarlassara, M. Seidlitz, P.-A. Söderström, A. M. Stefanini, O. Stezowski, S. Szilner, B. Szpak, C. Ur, J. J. Valiente-Dobón, M. Weinert, K. Wolf, and K. O. Zell.
Identification of high-spin proton configurations in ^{136}Ba and ^{137}Ba .
Physical Review C **99**(1), 014301 (2019).
72. L. Kaya, A. Vogt, P. Reiter, M. Siciliano, N. Shimizu, Y. Utsuno, H.-K. Wang, A. Gargano, L. Coraggio, N. Itaco, K. Arnswald, D. Bazzacco, B. Birkenbach, A. Blazhev, A. Bracco, B. Bruyneel, L. Corradi, F. C. L. Crespi, G. de Angelis, M. Droste, J. Eberth, A. Esmaylzadeh, E. Farnea, E. Fioretto, C. Fransen, A. Gadea, A. Giaz, A. Görgen, A. Gottardo, K. Hadynska-Klek, H. Hess, R. Hirsch, P. R. John, J. Jolie, A. Jungclaus, V. Karayonchev, L. Kornwebel, W. Korten, S. Leoni, L. Lewandowski, S. Lunardi, R. Menegazzo, D. Mengoni, C. Michelagnoli, T. Mijatović, G. Montagnoli, D. Montanari, ...et al.
Isomer spectroscopy in ^{133}Ba and high-spin structure of ^{134}Ba .
Physical Review C **100**(2), 024323 (2019).
73. OS. Kirsebom, M. Hukkanen, A. Kankainen, WH Trzaska, DF Strömberg, G. Martínez-Pinedo, K. Andersen, E. Bodewits, BA Brown, L. Canete, J. Cederkäll, T. Enqvist, T. Eronen, HOU Fynbo, S. Geldhof, R. de Groote, DG Jenkins, A. Jokinen, P. Joshi, A. Khanam, J. Kostensalo, P. Kuusiniemi, K. Langanke, I. Moore, M. Munch, DA Nesterenko, JD Ovejas, H. Penttilä, I. Pohjalainen, M. Reponen, S. Rinta-Antila, K. Riisager, A. de Roubin, P. Schotanus, PC Srivastava, J. Suhonen, JA Swartz, O. Tengblad, M. Vilen, S. Víñals, and J. Äystö.
Measurement of the $2+\rightarrow 0+$ ground-state transition in the β decay of 20F
Physical Review C **100**(6), 065805 (2019).
74. A. Knyazev, J. Park, P. Golubev, J. Cederkäll, H. Alvarez-Pol, P. Cabanelas, E. Casarejos, L. Caureret, D. Cortina-Gil, P. Díaz Fernández, M. Feijoo, D. Galaviz, E. Galiana, R. Gernhäuser, A.-L. Hartig, A. Heinz, B. Heiss, A. Ignatov, H. Johansson, P. Klenze, T. Kröll, T. Nilsson, A. Perea, H.-B. Rhee, O. Tengblad and P. Teubig.
Properties of the CsI(Tl) detector elements of the CALIFA detector.
Nuclear Inst. and Methods in Physics Research, A **940**, 393-404 (2019).
75. B. Laurent, F. M. Marqués, C. Angulo, N.I. Ashwood, M.J.G. Borge, V. Bouchat, W.N. Catford, N.M. Clarke, N. Curtis, M. Freer, F. Hanappe, V. Kinnard, M. Labiche, T. Materna, P. McEwan, T. Nilsson, A. Ninane, G. Normand, N.A. Orr, S.D. Pain, E. Prokhorova, L. Stuttgé and C. Timis.
Chronology of the three-body dissociation of ^8He .
Journal of Physics G: Nuclear and Particle Physics **46** (3), 03LT02 (2019).

76. Tadzio Levato, Leonardo V. Goncalves, and Vincenzo Giannini.
Laser-Plasma Accelerated Protons: Energy Increase in Gas-Mixtures Using High Mass Number Atomic Species.
Fluids **4** (3), 150 (2019).
77. R. Lică, F. Rotaru, M.J.G. Borge, S. Grévy, F. Negoită, A. Poves, O. Sorlin, A.N. Andreyev, R. Borcea, C. Costache, H. De Witte, L.M. Fraile, P.T. Greenlees, M. Huyse, A. Ionescu, S. Kisoyov, J. Konki, I. Lazarus, M. Madurga, N. Mărginean, R. Mărginean, C. Mihai, R.E. Mihai, A. Negret, F. Nowacki, R.D. Page, J. Pakarinen, V. Pucknell, P. Rahkila, E. Rapisarda, A. Ţerban, C.O. Sotty, L. Stan, M. Stănoiu, O. Tengblad, A. Turturică, P. Van Duppen, N. Warr, P. Dessagne, T. Stora, C. Borcea, S. Călinescu, J.M. Daugas, D. Filipescu, I. Kuti, S. Franchoo, I. Gheorghe, P. Morfouace, P. Morel J. Mrazek, D. Pietreanu, D. Sohler, I. Stefan, R. Șuvăilă, S. Toma and C. A. Ur.
Normal and intruder configurations in ^{34}Si populated in the $\beta-$ decay of ^{34}Mg and ^{34}Al
Physical Review C **100**(3), 034306 (2019).
78. V. Linh, X. Xiao, H.S. Jung, V. Giannini, S.A. Maier, D.-H. Kim, Y.-I. Lee, and S.-G. Park.
Compact Integration of TiO_2 Nanoparticles into the Cross-Points of 3D Vertically Stacked Ag Nanowires for Plasmon-Enhanced Photocatalysis.
Nanomaterials, **9** (3), 468 (2019).
79. H. N. Liu, A. Obertelli, P. Doornenbal, C. A. Bertulani, G. Hagen, J. D. Holt, G. R. Jansen, T. D. Morris, A. Schwenk, R. Stroberg, N. Achouri, H. Baba, F. Browne, D. Calvet, F. Château, S. Chen, N. Chiga, A. Corsi, M. L. Cortés, A. Delbart, J.-M. Gheller, A. Giganon, A. Gillibert, C. Hilaire, T. Isobe, T. Kobayashi, Y. Kubota, V. Lapoux, T. Motobayashi, I. Murray, H. Otsu, V. Panin, N. Paul, W. Rodriguez, H. Sakurai, M. Sasano, D. Steffenbeck, L. Stuhl, Y. L. Sun, Y. Togano, T. Uesaka, K. Wimmer, K. Yoneda, O. Aktas, T. Aumann, L. X. Chung, F. Flavigny, S. Franchoo, I. Gašparić, R.-B. Gerst, J. Gibelin, K. I. Hahn, D. Kim, T. Koiwai, Y. Kondo, P. Koseoglou, J. Lee, C. Lehr, B. D. Linh, T. Lokotko, M. MacCormick, K. Moschner, T. Nakamura, S. Y. Park, D. Rossi, E. Sahin, D. Sohler, P.-A. Söderström, S. Takeuchi, H. Törnqvist, V. Vaquero, V. Wagner, S. Wang, V. Werner, X. Xu, H. Yamada, D. Yan, Z. Yang, M. Yasuda, and L. Zanetti.
How Robust is the $N = 34$ Subshell Closure? First Spectroscopy of ^{52}Ar .
Physical Review Letters **122**, 072502 (2019).
80. I. López-Tocón, E. Imbarack, J. Soto, S. Sanchez-Cortes, P. Leyton, J. C. Otero.
Intramolecular and Metal-to-Molecule Charge Transfer Electronic Resonances in the Surface-Enhanced Raman Scattering of 1,4-Bis((E)-2-(Pyridin-4-Yl)Vinyl)Naphthalene f
Molecules **24**, 4622 (2019).
81. Ch. Lorenz, L. G. Sarmiento, D. Rudolph, P. Golubev, T. Eronen, D. A. Nesterenko, A. Kankainen, L. Canete, D. M. Cox, A. Fernandez, U. Forsberg, A. Jungclaus, I. Kojouharov, N. Kurz, N. Lalović, J. Partanen, M. Reponen, S. Rinta-Antila, A. de Roubin, A. Såmark-Roth, V. Vaquero and M. Vilén.
 β decay of ^{127}Cd and excited states in ^{127}In .
Physical Review C **99** (4), 044310 (2019).
82. D. Lubos, J. Park, T. Faestermann, R. Gernhäuser, R. Krücke, M. Lewitowicz, S. Nishimura, H. Sakurai, D. S. Ahn, H. Baba, B. Blank, A. Blazhev, P. Boutachkov, F. Browne, I. Čeliković, G. de France, P. Doornenbal, Y. Fang, N. Fukuda, J. Giovinazzo, N. Goel, M. Górska, S. Ilieva, N. Inabe, T. Isobe, A. Jungclaus, D. Kameda, Y. K. Kim, I. Kojouharov, T. Kubo, N. Kurz, Y. K. Kwon, G. Lorusso, K. Moschner, D. Murai, I. Nishizuka, Z. Patel, M. M. Rajabali, S. Rice, H. Schaffner, Y. Shimizu, L. Sinclair, P.-A. Söderström, K. Steiger, T. Sumikama, H. Suzuki, H. Takeda, Z. Wang, N. Warr, H. Watanabe, J. Wu and Z. Xu.
Improved Value for the Gamow-Teller Strength of the ^{100}Sn Beta Decay.
Physical Review Letters **122** (22), 222502 (2019).
83. M. Martín-Garrido, M. T. Molina-Delgado y S. Martínez-Ramírez.
A comparison between experimental and theoretical Ca/Si ratios in C–S–H and C–S(A)–H gels.
Journal of Sol-Gel Science and Technology (2019).
84. S. Martínez-Ramírez, M. Frías, E.Y. Nakasnishi, H. Savastano.
Pozzolanic Reaction of a Biomass Waste as Mineral Addition to Cement Based Materials: Studies by Nuclear Magnetic Resonance (NMR).
International Journal of Concrete Structures and Materials **13** (1), 31 (2019).
85. S. Martínez-Ramírez, L. R. Higueruela, I. Cascales, M. Martín-Garrido and M.T. Blanco-Varela.
New approach to nanolime synthesis at ambient temperature.
SN Applied Sciences **1**, 105 (2019).

86. M. Moratalla, J. F. Gebbia, M. Angel Ramos, L. Carlos Pardo, S. Mukhopadhyay, S. Rudic, F. Fernandez-Alonso, F. J. Bermejo, J. Lluís Tamarit.
Emergence of glassy features in halomethane crystals.
Physical Review B **99**, 024301 (2019).
87. B. Olaizola, L. M. Fraile, H. Mach, F. Nowacki, A. Poves, A. Aprahamian, J. A. Briz, J. Cal-González, D. Ghiță, U. Köster, W. Kurcewicz, S. R. Lesher, D. Pauwels, E. Picado, D. Radulov, G. S. Simpson and J. M. Udías.
Properties of low-lying states in ^{65}Co from lifetime measurements.
Physical Review C **99**, 024321 (2019).
88. J. Olmos-Trigo, C. Sanz-Fernández, D. R. Abujetas, J. A. Sánchez-Gil, A. García-Etxarri, G. Molina-Terriza, F. S. Bergeret, and J. J. Sáenz.
Role of the absorption on the spin-orbit interactions of light with Si nano-particles.
Journal of Applied Physics **126**, 033104 (2019).
89. S.J. Palmer, X. Xiao, N. Pazos-Pérez, L. Guerrini, M.A. Correa-Duarte, S.A. Maier, R.V. Craster, R.A. Álvarez-Puebla and V. Giannini.
Extraordinarily transparent compact metallic metamaterials.
Nature Communications **10** (1), 2118 (2019).
90. R. Paniagua-Domínguez, B. Luk'yanchuk, A. Miroshnichenko, and J. A. Sánchez-Gil.
Dielectric nanoresonators and metamaterials.
Journal of Applied Physics **126**, 150401 (2019).
91. J. Park, R. Krücke, D. Lubos, R. Gernhäuser, M. Lewitowicz, S. Nishimura, D. S. Ahn, H. Baba, B. Blank, A. Blazhev, P. Boutachkov, F. Browne, I. Celiković, G. de France, P. Doornenbal, T. Faestermann, Y. Fang, N. Fukuda, J. Giovinazzo, N. Goel, M. Górska, H. Grawe, S. Ilieva, N. Inabe, T. Isobe, A. Jungclaus, D. Kameda, G. D. Kim, Y.-K. Kim, I. Kojouharov, T. Kubo, N. Kurz, Y. K. Kwon, G. Lorusso, K. Moschner, D. Murai, I. Nishizuka, Z. Patel, M. M. Rajabali, S. Rice, H. Sakurai, H. Schaffner, Y. Shimizu, L. Sinclair, P.-A. Söderström, K. Steiger, T. Sumikama, H. Suzuki, H. Takeda, Z. Wang, H. Watanabe, J. Wu, and Z. Y. Xu.
New and comprehensive β - and $\beta\bar{p}$ -decay spectroscopy results in the vicinity of ^{100}Sn .
Physical Review C **99**, 034313 (2019).
92. S.-G. Park, X. Xiao, J. Min, C. Mun, H. S. Jung, V. Giannini, R. Weissleder, S. A. Maier, H. Im and D.-H. Kim.
Self-Assembly of Nanoparticle-Spiked Pillar Arrays for Plasmonic Biosensing.
Advanced Functional Materials **29**, 1904257 (2019).
93. N. Paul, A. Obertelli, C. A. Bertulani, A. Corsi, P. Doornenbal, J. L. Rodríguez-Sánchez, G. Authelet, H. Baba, D. Calvet, F. Château, S. Chen, A. Delbart, J.-M. Gheller, A. Giganon, A. Gillibert, T. Isobe, V. Lapoux, M. Matsushita, S. Momiyama, T. Motobayashi, M. Niikura, H. Otsu, C. Péron, A. Peyaud, E. C. Pollacco, J.-Y. Roussé, H. Sakurai, C. Santamaria, M. Sasano, Y. Shiga, D. Steppenbeck, S. Takeuchi, R. Taniuchi, T. Uesaka, H. Wang, K. Yoneda, T. Ando, T. Arici, A. Blazhev, F. Browne, A. M. Bruce, R. Carroll, L. X. Chung, M. L. Cortés, M. Dewald, B. Ding, Zs. Dombradi, F. Flavigny, S. Franschoo, F. Giacoppo, M. Górska, A. Gottardo, K. Hadynska-Klek, Z. Korkulu, S. Koyama, Y. Kubota, A. Jungclaus, J. Lee, ...*et al.*
Prominence of Pairing in Inclusive ($p,2p$) and (p,pn) Cross Sections from Neutron-Rich Nuclei.
Physical Review Letters **122**, 162503 (2019).
94. N. Pazos-Pérez, J.M. Fitzgerald, V. Giannini, L. Guerrini and R.A. Álvarez-Puebla.
Modular assembly of plasmonic core-satellite structures as highly brilliant SERS-encoded nanoparticles.
Nanoscale Advances **1**, 122-131 (2019).
95. V. H. Phong, G. Lorusso, T. Davinson, A. Estrade, O. Hall, J. Liu, K. Matsui, F. Montes, S. Nishimura, A. Bosio, P. H. Regan, R. Shearman, Z. Y. Xu, J. Agramunt, J. M. Allmond, D. S. Ahn, A. Algora, H. Baba, N. T. Brewer, C. G. Bruno, R. Caballero-Folch, F. Calvino, M. Wolińska-Cichocka, G. Cortes, I. Dillmann, C. Domingo-Pardo, A. Gargano, S. Go, C. J. Griffin, R. K. Grzywacz, L. Harkness-Brennan, T. Isobe, A. Jungclaus, D. Kahl, L. H. Khiem, G. Kiss, A. Korgul, S. Kubono, K. Miernik, A. I. Morales, N. Nepal, M. Piersa, Zs. Podolyák, B. C. Rasco, K. P. Rykaczewski, H. Sakurai, Y. Shimizu, D. W. Stacener, T. Sumikama, H. Suzuki, H. Takeda, J. L. Tain, A. Tarifeño-Saldivia, A. Tolosa-Delgado, V. Vaquero, P. J. Woods, R. Yokoyama, and C. Yuan.
Observation of a μ s isomer in $^{134}\text{In}_{85}$: Proton-neutron coupling "southeast" of Sn-132(50)82
Physical Review C **100** (1), 011302(R) (2019).

96. R.A.C. Picot, M. Puiatti, A. Ben Altabef, R.J.G. Rubira, S. Sanchez-Cortes, S.B. Diaz, M.E. Tuttolomondo. *A Raman, SERS and UV-circular dichroism spectroscopic study of: N-acetyl-l-cysteine in aqueous solutions.* New Journal of Chemistry **43** (38), 15201-15212 (2019).
97. M. Piersa, A. Korgul, L. M. Fraile, J. Benito, E. Adamska, A. N. Andreyev, R. Álvarez-Rodríguez, A. E. Barzakh, G. Benzoni, T. Berry, M. J. G. Borge, M. Carmona, K. Chrysalidis, J. G. Correia, C. Costache, J. G. Cubiss, T. Day Goodacre, H. De Witte, D. V. Fedorov, V. N. Fedosseev, G. Fernández-Martínez, A. Fijałkowska, M. Fila, H. Fynbo, D. Galaviz, P. T. Greenlees, R. Grzywacz, L. J. Harkness-Brennan, C. Henrich, M. Huyse, A. Illana, Z. Janas, K. Johnston, D. S. Judson, V. Karanyonchev, M. Kicinska-Habior, J. Konki, J. Kurcewicz, I. Lazarus, R. Lică, H. Mach, M. Madurga, I. Marroquín, B. Marsh, M. C. Martínez, C. Mazzocchi, N. Marginean, R. Marginean, K. Miernik, C. Mihai, E. Nácher, A. Negret, B. Olaizola, R. D. Page, S. Paulaskalas, S. Pascu, A. Perea, V. Pucknell, P. Rahkila, E. Rapisarda, J.-M. Régis, F. Rotaru, S. Rothe, V. Sánchez-Tembleque, G. Simpson, Ch. Sotty, L. Stan, M. Stănoiu, M. Stryjczyk, O. Tengblad, A. Turturica, J. M. Udiás, P. Van Duppen, V. Vedia, A. Villa, S. Viñals, R. Wadsworth, W. B. Walters and N. Warr. *β decay of ^{133}In : γ emission from neutron-unbound states in ^{133}Sn .* Physical Review C **99**(2), 024304 (2019).
98. S. R. Pocock, P. A. Huidobro, and V. Giannini. *Bulk-edge correspondence and long-range hopping in the topological plasmonic chain.* Nanophotonics, **8** (8), 1337–1347 (2019).
99. M. Proctor, R. V. Craster, S. A. Maier, V. Giannini, and P. A. Huidobro. *Exciting Pseudospin-Dependent Edge states in plasmonic metasurfaces.* ACS Photonics **6** (11), 2985–2995 (2019).
100. D. Ralet, E. Clément, G. Georgiev, A.E. Stuchbery, M. Rejmund, P. Van Isacker, G. de France, A. Lemasson, J. Ljungvall, C. Michelagnoli, A. Navin, D.L. Balabanski, L. Atanasova, A. Blazhev, G. Bocchi, R. Carroll, J. Dudouet, E. Dupont, B. Fornal, S. Fransoo, C. Fransen, C. Müller-Gatermann, A. Goasduff, A. Gadea, P.R. John, D. Kocheva, T. Konstantinopoulos, A. Korichi, A. Kusoglu, S.M. Lenzi, S. Leoni, R. Lozeva, A. Maj, R. Perez, N. Pietralla, C. Shand, O. Stezowski, D. Wilmsen, D. Yordanov, D. Barrientos, P. Bednarczyk, B. Birkenbach, A.J. Boston, H.C. Boston, I. Burrows, B. Cederwall, M. Ciemala, J. Collado, F. Crespi, D. Cullen, H.J. Eberth, J. Goupil, L. Harkness, H. Hess, A. Jungclaus, W. Korten, M. Labiche, R. Menegazzo, D. Mengoni, B. Million, J. Nyberg, Zs. Podolyák, A. Pullia, B. Quintana Arnés, F. Recchia, P. Reiter, F. Saillant, M.D. Salsac, E. Sanchis, C. Theisen, J.J. Valiente Dobon and O. Wieland. *Evidence of octupole-phonons at high spin in ^{207}Pb .* Physics Letters, Section B **797**, 134797 (2019).
101. M. S. Rider, S. J. Palmer, S. R. Pocock, X. Xiao, P. Arroyo Huidobro, and V. Giannini. *A perspective on topological nanophotonics: Current status and future challenges.* Journal of Applied Physics **125** (12), 120901 (2019).
102. R.J.G. Rubira, C.J.L. Constantino, J.C. Otero, S. Sánchez-Cortés. *Abiotic Degradation of S-Triazine Pesticides Analyzed by Surface-Enhanced Raman Scattering.* Journal of Raman Spectroscopy **51**, 264-273 (2019).
103. M. Sánchez-Arenillas, M. Oujja, F. Moutinho, J. de la Figuera, M.V. Cañamares, A. Quesada, M. Castillejo and J.F. Marco. *Bulk and surface characterisation of micrometer-thick cobalt ferrite films grown by IR PLD.* Applied Surface Science **470**, 917-922 (2019).
104. M. Schnedlitz, R. Fernández-Perea, D. Knez, M. Lasserus, A. Schiffmann, F. Hofer, A.W. Hauser, María Pilar de Lara-Castells and Wolfgang E. Ernst. *Effects of the Core Location on the Structural Stability of Ni–Au Core–Shell Nanoparticles* Journal of Physical Chemistry C **123** (32), 20037-20043 (2019).
105. J. Soto, E. Imbarack, I. López-Tocón, S. Sánchez-Cortés, J.C. Otero and P. Leyton. *Application of surface-enhanced resonance Raman scattering (SERS) to the study of organic functional materials: Electronic structure and charge transfer properties of 9,10-bis((E)-2-(pyridin-4-yl)vinyl)anthracene.* RSC Advances **9** (25), 14511-14519 (2019).

106. V. Vaquero, A. Jungclaus, P. Doornenbal and K. Wimmer.
In-beam γ -ray spectroscopy of nuclei in the ^{132}Sn region performed at RIKEN.
Nuovo Cimento della Societa Italiana di Fisica C **42**, 107 (2019).
107. V. Vaquero, A. Jungclaus, P. Doornenbal, K. Wimmer, A. M. Moro, K. Ogata, T. Furumoto, S. Chen, E. Nácher, E. Sahin, Y. Shiga, D. Steppenbeck, R. Taniuchi, Z. Y. Xu, T. Ando, H. Baba, F. L. Bello Garrote, S. Franchoo, K. Hadynska-Klek, A. Kusoglu, J. Liu, T. Lokotko, S. Momiyama, T. Motobayashi, S. Nagamine, N. Nakatsuka, M. Niikura, R. Orlandi, T. Y. Saito, H. Sakurai, P. A. Söderström, G. M. Tveten, Zs. Vajta and M. Yalcinkaya.
In-beam γ -ray spectroscopy of ^{136}Te at relativistic energies.
Physical Review C **99** (3), 034306 (2019).
108. V. Vaquero, A. Jungclaus, J.L. Rodríguez-Sánchez, J.A. Tostevin, P. Doornenbal, K. Wimmer, S. Chen, E. Nácher, E. Sahin, Y. Shiga, D. Steppenbeck, R. Taniuchi, Z.Y. Xu, T. Ando, H. Baba, F.L. Bello Garrote, S. Franchoo, A. Gargano, K. Hadynska-Klek, A. Kusoglu, J. Liu, T. Lokotko, S. Momiyama, T. Motobayashi, S. Nagamine, N. Nakatsuka, M. Niikura, R. Orlandi, T. Saito, H. Sakurai, P.A. Söderström, G.M. Tveten, Zs. Vajta, M. Yalcinkaya.
Inclusive cross sections for one- and multi-nucleon removal from Sn, Sb, and Te projectiles beyond the $N = 82$ shell closure.
Physics Letters, Section B **795**, 356-361 (2019).
109. N. Wang, M. Zeisberger, U. Huebner, V. Giannini, and M. A. Schmidt.
Symmetry-breaking induced magnetic Fano resonances in densely packed arrays of symmetric nanotrimmers.
Scientific Report **9** (1), 2873 (2019).
110. H. Watanabe, H.K. Wang, G. Lorusso, S. Nishimura, Z.Y. Xu, T. Sumikama, P.-A. Söderström, P. Doornenbal, F. Browne, G. Gey, H.S. Jung, J. Taprogge, Zs. Vajta, J. Wu, A. Yagi, H. Baba, G. Benzoni, K.Y. Chae, F.C.L. Crespi, N. Fukuda, R. Gernhäuser, N. Inabe, T. Isobe, A. Jungclaus, D. Kameda, G.D. Kim, Y.K. Kim, I. Kojouharov, F.G. Kondev, T. Kubo, N. Kurz, Y.K. Kwon, G.J. Lane, Z. Li, C.-B. Moon, A. Montaner-Pizá, K. Moschner, F. Naqvi, M. Niikura, H. Nishibata, D. Nishimura, A. Odahara, R. Orlandi, Z. Patel, Zs. Podolyák, H. Sakurai, H. Schaffner, G.S. Simpson, K. Steiger, Y. Sun, H. Suzuki, H. Takeda, A. Wendt, K. Yoshinaga.
New isomers in $^{125}\text{Pd}_{79}$ and $^{127}\text{Pd}_{81}$: Competing proton and neutron excitations in neutron-rich palladium nuclides towards the $N=82$ shell closure.
Physics Letters B **792**, 263–268 (2019).
111. C. Zhang, G. Cao, S. Wu, W. Shao, V. Giannini, S.A. Maier and X. Li.
Thermodynamic loss mechanisms and strategies for efficient hot-electron photoconversion.
Nano Energy **55**, 164-172 (2019).

PUBLICACIONES CONJUNTAS CON EL DPTO. DE QUÍMICA Y FÍSICA TEÓRICAS

PUBLICATIONS IN COMMON WITH THE PHYSICS AND CHEMISTRY DEPARTMENT

- V. Guadilla, A. Algara, J. L. Tain, J. Agramunt, J. Äystö, J. A. Briz, A. Cucoanes, T. Eronen, M. Estienne, M. Fallot, L.M. Fraile, E. Ganioglu, W. Gelletly, D. Gorelov, J. Hakala, A. Jokinen, D. Jordan, A. Kankainen, V. Kolhinen, J. Koponen, M. Lebois, L. Le Meur, T. Martinez, M. Monserrate, A. Montaner-Pizá, I. Moore, E. Nácher, S.E.A. Origo, H. Penttilä, I. Pohjalainen, A. Porta, J. Reinikainen, M. Reponen, S. Rinta-Antila, B. Rubio, K. Rytkönen, P. Sarriguren, T. Shiba, V. Sonnenschein, A.A. Sonzogni, E. Valencia, V. Vedia, A. Voss, J.N. Wilson, and A.-A. Zakari-Issoufou.
Total absorption γ -ray spectroscopy of niobium isomers.
Physical Review C **100**, 024311 (2019).

6.1.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS

112. C. Cabezas, C. Bermúdez, J. D. Gallego, B. Tercero, J. M. Hernández, I. Tanarro, V. J. Herrero, J. L. Doménech, and J. Cernicharo.
The millimeter-wave spectrum and astronomical search of succinonitrile and its vibrational excited states.
Astronomy and Astrophysics, A&A **629**, A35 (2019), 8 pages.

113. J. Cernicharo, J. D. Gallego, J. A. López-Pérez, F. Tercero, I. Tanarro, F. Beltrán, P. de Vicente, K. Lauwaet, B. Alemán, E. Moreno, V. J. Herrero, J. L. Doménech, S. I. Ramírez, C. Bermúdez, R. J. Peláez, M. Patino-Esteban, I. López-Fernández, S. García-Álvaro, P. García-Carreño, C. Cabezas, I. Malo, R. Amils, J. Sobrado, C. Diez-González, J.M. Hernández, B. Tercero, G. Santoro, L. Martínez, M. Castellanos, B. Vaquero Jiménez, J. R. Pardo, L. Barbas, J.A. López-Fernández, B. Aja, A. Leuther, and J. A. Martín-Gago.
Broad band high resolution rotational spectroscopy for Laboratory Astrophysics.
Astronomy and Astrophysics, A&A **626**, A34 (2019), 29 pages.
114. F. Colmenero.
Silver Oxalate: Mechanical Properties and Extreme Negative Mechanical Phenomena.
Advanced Theory and Simulations **2**, 1900040 (2019).
115. Francisco Colmenero.
Structural, spectroscopic, and thermodynamic characterization of ammonium oxalate monohydrate mineral using theoretical solid-state methods.
Journal of Physics and Chemistry of Solids **125**, 31 (2019).
116. Francisco Colmenero.
Negative area compressibility in oxalic acid dehydrate.
Materials Letters **245**, 25 (2019).
117. Francisco Colmenero.
Anomalous mechanical behavior of the deltic, squaric and croconic cyclic oxocarbon acids.
Materials Research Express **6**, 4 (2019).
118. Francisco Colmenero.
Mechanical properties of anhydrous oxalic acid and oxalic acid dehydrate.
Physical Chemistry Chemical Physics **21**, 2673 (2019).
119. F. Colmenero, J. Cobos, and V. Timón.
Negative linear compressibility in uranyl square monohydrate.
Journal of Physics-Condensed Matter **31**, 175701 (2019).
120. F. Colmenero, J. Cobos, and V. Timón.
Periodic density functional theory study of the Raman spectrum of the hydrated uranyl oxyhydroxide mineral becquerelite.
Theoretical Chemistry Accounts **138**, 46 (2019).
121. F. Colmenero, and R. Escribano.
Thermodynamic, Raman Spectroscopic, and UV-Visible Optical Characterization of the Deltic, Squaric, and Croconic Cyclic Oxocarbon Acids.
Journal of physical chemistry, A **123**, 4241-4261 (2019).
122. F. Colmenero, A.M. Fernández, J. Cobos, and V. Timón.
Periodic DFT Study of the Thermodynamic Properties and Stability of Schoepite and Metaschoepite Mineral Phases.
ACS Earth and Space Chemistry **3**, 17 (2019).
123. F. Colmenero, J. Plášil, J. Cobos, J. Sejkora, V. Timón, V.; J. Cejka, and L.J. Bonales.
Crystal structure, hydrogen bonding, mechanical properties and Raman spectrum of the lead uranyl silicate monohydrate mineral kasolite.
RSC Advances **9**, 15323 (2019).
124. F. Colmenero, J. Plášil, J. Cobos, J. Sejkora, V. Timón, V.; J. Cejka, L.J. Bonales, A.M. Fernández, and V. Petříček.
Structural, mechanical, spectroscopic and thermodynamic characterization of the copper-uranyl tetrahydroxide mineral vandenbrandeite.
RSC Advances **9** 40708 (2019).
125. F. Colmenero, J. Plášil, and J. Sejkora.
The layered uranyl silicate mineral uranophane-β crystal structure, mechanical properties, Raman spectrum and comparison with the alpha-polymorph.
Dalton Transactions **48**, 16722-16736 (2019).

126. Rafael Escribano, Pedro C. Gómez, Belén Maté, Germán Molpeceres, and Emilio Artacho.
Prediction of the near-IR spectra of ices by ab initio molecular dynamics.
Phys. Chem. Chem. Phys., **21**, 9433-9440 (2019).
127. Fallaque-Najar, J.; Morales-Gomero, J.C.; Timon, V.
A theoretical approach of the ethanol adsorption on Au(100), Au(110) and Au(111) surfaces.
Surface Science **686**, 121458 (2019)
128. F. Gámez, J. M. Fernández, E. Moreno, G. Tejeda, M. I. Hernández, and S. Montero.
Inelastic Collisions of O₂ with He at Low Temperatures.
Journal of Physical Chemistry A **123**, 8496-8505 (2019).
129. P. G. Jambrina, A. Zanchet, M. Menéndez, V. J. Herrero, and F. J. Aoiz.
Unexpected dynamical effects change the lambda-doublet propensity in the tunneling régión for the O(³P)+H₂ reaction.
Physical Chemistry Chemical Physics, **21**, 25389-25396 (2019)
130. Miguel Jiménez-Redondo, Isabel Tanarro, Ramón Peláez, Lidia Díaz-Pérez and Víctor J. Herrero.
Ionic Polymerization in Cold Plasmas of Acetylene with Ar and He.
The Journal of Physical Chemistry A **123**, 8135-8147 (2019).
131. R. Z. Martínez, D. Bermejo, F. Thibault and P. Wcislo.
Accurate wavenumber measurements for the S(0), S(1) and S(2) pure rotational Raman lines of D2.
Journal of Raman Spectroscopy **50**(1), 127-129 (2019).
132. B. Maté, M. Jiménez-Redondo, R. J. Peláez, I. Tanarro, and V. J. Herrero.
Desorption of N₂, CO, CH₄ and CO₂ from interstellar carbonaceous dust analogues.
Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, MNRAS **490**, 2936–2947 (2019).
133. Germán Molpeceres, Albert Rimola , Cecilia Ceccarelli, Johannes Kästner, Piero and Belén Maté.
Silicate-mediated interstellar water formation: a theoretical study.
Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, MNRAS **482**, 5389–5400 (2019), 12 pages.
134. R.J. Peláez, E. Rebollar, R. Serna, C. Acosta-Zepeda, P. Saavedra, J. Bonse, and E. Haro-Poniatowski.
Nanosecond laser-induced interference grating formation on silicon.
Journal of Physics D - Applied Physics **52**, 225302 (2019).
135. V.Sáez-Rábanos, J. E. Verdasco and V. J. Herrero.
Orbiting resonances in th F+HD(v=0,1) reaction at very low collision energies. A quantum dynamical study.
Physical Chemistry Chemical Physics **21**, 15177-15186 (2019).

PUBLICACIONES CONJUNTAS CON EL DPTO. DE QUÍMICA Y FÍSICA TEÓRICAS

PUBLICATIONS IN COMMON WITH THEORETICAL PHYSICS AND CHEMISTRY DEPARTMENT

N.E.H. Bensiradj, V. Timón, R. Boussassi, S. Dalbouha, and M.L. Senent.
DFT studies of single and multiple molecular adsorption of CH₄, SF₆ and H₂O in Zeolitic- Imidazolate Framework (ZIF₄ and ZIF₆).
Inorganica Chimica Acta **490**, 272 (2019).

J.M. Fernández, G. Tejeda, M. Carvajal and M.L. Senent.
New spectral characterization of dimethyl ether Isotopologues CH₃OCH₃ and ¹³CH₃OCH₃ in the THz region.
The Astrophysical Journal Supplement Series **241**, 13 (2019).

6.1.4 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

136. M.J. Capitán, J. Álvarez, S. Puebla, M.J. Spilsbury, J.J. Conde, B.H. Juárez, and R. Otero.
Characterizing the CdSe nanodots in the vicinity of the monolayer covering range.
RSC Advances **9**, 41531-41539 (2019).

137. P. Enrique-Jiménez, S. Quiles-Díaz, H.J. Salavagione, J.P. Fernández-Blázquez, M.A. Monclús, R. Guzmán de Villoria, M.A. Gómez-Fatou, F. Ania, and A. Flores.
Nanoindentation mapping of multiscale composites of graphene-reinforced polypropylene and carbon fibres.
Comp. Sci. Technol. **169** pp 151–157 (2019).
138. I. Flores, A. Basterretxea, A. Etxeberria, A. González, C. Ocando, J.F. Vega, J. Martínez-Salazar, H. Sardon, and A.J. Müller.
Organocatalyzed Polymerization of PET-mb-poly(oxyhexane) Copolymers and Their Self-Assembly into Double Crystalline Superstructures.
Macromolecules **52(18)** pp 6834-6848 (2019).
139. I. Flores, A. Etxeberria, L. Irusta, I. Calafel, J.F. Vega, J. Martínez-Salazar, H. Sardon, and A.J. Müller.
PET-ran-PLA Partially Degradable Random Copolymers Prepared by Organocatalysis: Effect of Poly(L-lactic acid) Incorporation on Crystallization and Morphology.
ACS Sustainable Chem. & Eng. **7 (9)** pp 8647-8659 (2019).
140. S. Gottlieb, B. Rösner, L. Evangelio, M. Fernández-Regúlez, A. Nogales, M.C. García-Gutiérrez, T.F. Keller, J. Fraxedas, T.A. Ezquerra, C. David, and F. Pérez-Murano.
Self-Assembly Morphology of Block Copolymers in Sub-10 nm Topographical Guiding Patterns.
Molecular Systems Design & Engineering **4** pp 175-185 (2019).
141. G. Guidotti, M. Soccio, M.C. García-Gutiérrez, E. Gutiérrez-Fernández, T.A. Ezquerra, V. Siracusa, A. Munari, and N. Lotti.
Evidence of a 2D-Ordered Structure in BiobasedPoly(pentamethylene furanoate) Responsible for Its Outstanding Barrier and Mechanical Properties.
ACS Sustainable Chem. Eng. **7** pp 17863-17871(2019).
142. E. Gutiérrez-Fernández, A. Rodríguez-Rodríguez, M.C. García-Gutiérrez, A. Nogales, T.A. Ezquerra, and E. Rebollar.
Functional Nanostructured Surfaces Induced by Laser on Fullerene Thin Films.
Applied Surface Science **476** pp 668-675 (2019).
143. E. Gutiérrez-Fernández, I. Gabaldón-Saucedo, M.C. García-Gutiérrez, A. Varea, A. Nogales, E. Rebollar, A. Vilà, T.A. Ezquerra, and A. Cirera.
Quantitative assessment by local probe methods of the mechanical and electrical properties of inkjet-printed PEDOT:PSS thin films over Indium Tin Oxide substrates.
Organic Electronics **70** pp 258-263 (2019).
144. E. Gutiérrez-Fernández, E. Rebollar, J. Cui, T.A. Ezquerra, and A. Nogales.
Morphology and ferroelectric properties of semiconducting/ferroelectric polymer bilayers.
Macromolecules **52(19)** pp 7396-7402, (2019)
145. J.J. Hernández, I. Puente-Orench, T.A. Ezquerra, E. Gutiérrez-Fernández, and M.C. García-Gutiérrez.
Confinement effects in one-dimensional nanoarrays of polymer semiconductors and their photovoltaic blends photovoltaic blends.
Polymer **163** pp 13-19 (2019).
146. I. Irska, A. Linares, E. Piesowicz, S. Paszkiewicz, Z. Roslaniec, A. Nogales, and TA Ezquerra.
Dielectric spectroscopy of novel bio-based aliphatic-aromatic block copolymers: Poly(butylene terephthalate)-b-poly(lactic acid).
European Physics Journal E **42** pp 107 (2019).
147. A. Nogales, E. Gutiérrez-Fernández, M.C. García Gutiérrez, T.A. Ezquerra, E. Rebollar, I. Sics, M. Malfois, S. Gaidukovs, E. Gecis, K. Celms, and G. Bakradze.
Structure Development in Polymers during Fused Filament Fabrication (FFF): An in-situ Small and Wide Angle X-ray Scattering Study using Synchrotron Radiation.
Macromolecules **52** pp 9715-9723 (2019).
148. M. Palenzuela, M.T. Muñoz, J.F. Vega, A. Gutiérrez-Rodríguez, T. Cuenca, and M.E.G. Mosquera.
Heterobimetallic aluminate derivatives with bulky phenoxide ligands: a catalyst for selective vinyl polymerization.
Dalton Transactions **48 (19)** pp 6435-6444 (2019).

149. S. Paszkiewicz, D. Pawlikowska, M. Kurcz, A. Szymczyk, I. Irska, R. Stanik, M. Gude, A. Linares, T.A. Ezquerra, L. Lipinska, M. Woluntarski, A. Zubkiewicz, and E. Piesowicz.
Functional Properties of Poly(Trimethylene Terephthalate)-Block-Poly(Caprolactone) Based Nanocomposites Containing Graphene Oxide (GO) and Reduced Graphene Oxide (rGO).
Nanomaterials **9** (**10**), article number: 1459 (2019).
150. S. Paszkiewicz, I. Taraghi, D. Pawlikowska, A. Szymczyk, I. Irska, R. Stanik, A. Linares, T.A. Ezquerra, and E. Piesowicz.
Influence of hybrid system of nanofillers on the functional properties of postconsumer PET-G-based nanocomposites.
Polymers for Advanced Technologies **(30)12** pp 2983-2992 (2019).
151. J. Ramos, J. F. Vega, V. Cruz, E. Sánchez-Sánchez, J. Cortés and J. Martínez-Salazar.
Hydrodynamic and Electrophoretic Properties of Trastuzumab/HER2 Extracellular Domain Complexes as Revealed by Experimental Techniques and Computational Simulations.
International Journal of Molecular Sciences **20** (**5**) pp 1076 (2019).
152. A. Rodríguez-Rodríguez, E. Gutiérrez-Fernández, M.C. García-Gutiérrez, A. Nogales, T.A. Ezquerra, and E. Rebollar.
Synergistic Effect of Fullerenes on the Laser Induced Periodic Surface Structuring of Poly (3-hexyl thiophene).
Polymers **11** pp 190 (2019).
153. R.I. Rodríguez-Beltrán, D.E. Martínez-Tong, A. Reyes-Contreras, S. Paszkiewicz, A. Szymczyk, T.A. Ezquerra, P. Moreno, and E. Rebollar.
Laterally-resolved mechanical and tribological properties of laser-structured polymer nanocomposites.
Polymer **168** pp 178-184 (2019).
154. I. Taraghi, S. Paszkiewicz, A. Fereidoon, A. Szymczyk, R. Stanik, M. Gude, A. Linares, T.A. Ezquerra, E. Piesowicz, K. Wilpiszewska, and Z. Roslaniec.
Thermally and electrically conducting polycarbonate/elastomer blends combined with multiwalled carbon nanotubes.
Journal of Thermoplastic Composite Materials, UNSP 0892705719868275 (2019).
155. A. Romo-Uribe, A. Flores, and M. Domínguez-Díaz
Electrospinning of poly(β -hydroxybutyrate) scaffolds: morphology and aging.
Emerging Materials Research, **8**, 127 (2019).
156. V. Yuste-Sánchez, M. Hernández, T.A. Ezquerra, R. Verdejo, and M.A. López-Manchado.
In-situ cure monitoring of epoxy/graphene nanocomposites by several spectroscopic techniques.
Polymer Testing **80** pp 106114 (2019).

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. H. Elhadki, Z. Lakbaibi, M. Salah, K. Marakchi, O. Keltoum Kabbaj, M.L. Senent, and N. Komiha.
The formation of interstellar organic molecules: H₂C₃O. A DFT and ELF theoretical study.
Mediterranean Journal of Chemistry **9**, 175 (2019).
2. M.K. Gaidarov, I. Moumene, A. N. Antonov, D.N. Kadrev, P. Sarriuguren, and E. Moya de Guerra.
Isotopic and Isotonic Evolution of the Symmetry Energy and Skuns of Mirror Nuclei.
Proceedings of the 38th International Workshop on Nuclear Theory **38**, 83 (2019).
ISSN: 1313-2822.

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

3. J. M. Fitzgerald and V. Giannini.
Surface phonon polaritonics made simple: great as plasmonics but lower losses.
 Advanced Photonics **1**(2), 020503 (2019).

6.3 LIBROS, MONOGRAFÍAS Y OTRAS PUBLICACIONES DE PROCEEDINGS BOOKS, PROCEEDINGS AND OTHER PUBLICATIONS

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

1. S. Ihantola, O. Tengblad, N. Chitumbo, C. Csóme, J.-T. Eisheh, E. Kröger, J. Paepen, K. Peräjärvi, J. Röning, F. Schneider, H. Toivonen and G. M. Karagiannis.
Impact of Novel Technologies on Nuclear Security and Emergency Preparedness.
 Editorial: Publications Office of the European Union (2019).
 ISBN: 978-92-79-98659-8
2. O. Tengblad, K. Peräjärvi, H. Toivonen, H. Tagziria, H. Schoech, J.-T. Eisheh and E. A. Kröger.
National and cross-border expert support for nuclear security.
 Editorial: Publications Office of the European Union (2019).
 ISBN: 978-92-79-98659-8
3. E. Castaño, G. Pérez, G. García-Rosales, E. Asensio, S. Martínez-Ramírez, C. Alonso, F. Martín-Consuegra, I. Sánchez de Rojas, A. Guerrero, I. Oteiza.
Evolución superficial de la fachada del S. XVI del rectorado de la Universidad de Alcalá de Henares-España.
 Libro: III Congreso Internacional Hispanoamericano de Historia de la Construcción V. I y II.
 Editorial: Instituto Juan de Herrera. Escuela Técnica Superior de Arquitectura, Spain, (2019).
 ISBN: 9788497285704

6.3.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS

4. Francisco Colmenero.
The Application of Periodic Density Functional Theory to the Study of Uranyl Containing Materials: Thermodynamic Properties and Stability in ‘Density Functional Theory’. InTechOpen (2019).
5. Francisco Colmenero.
Theoretical Studies of the Structural, Mechanic and Raman Spectroscopic Properties of Uranyl Containing Minerals in ‘Minerals’. InTechOpen. 65-94 p. (2019).

6.3.4 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

6. E. Rebollar, T.A. Ezquerra, and A. Nogales.
Laser-Induced Periodic Surface Structures (LIPSS) on Polymer Surfaces. Chapter 6 in 'Wrinkled Polymer Surfaces Strategies, Methods and Applications', González-Henríquez C, Rodríguez-Hernández J (Eds.) Springer (2019).

6.4 TESIS DOCTORALES PH.D. THESES

6.4.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS

Title: *Interstellar Dust Analogues: Structure, survivability adn Physical Process*

University: Universidad de Valladolid

Date: 7th of March 2019

Mark: Sobresaliente “cum laude”

Candidate: Germán Molpeceres de Diego

Supervisor: Belén Maté Naya

6.4.4 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

Title: *Nanoestructurado de materia condensada blanda con aplicaciones en electrónica orgánica*

University: Facultad de Ciencias Físicas, Universidad Complutense de Madrid

Date: 21st of October 2019

Mark: Sobresaliente “cum laude”

Candidate: Edgar Gutiérrez Fernández

Supervisor: Aurora Nogales Ruiz, Mari Cruz García Gutiérrez and Esther Rebollar González

Title: *Nanoindentación y nanoestructura de compuestos poliméricos basados en grafeno*

University: Facultad de Ciencias (Sección CC Físicas), Universidad Autónoma de Madrid

Date: 29th of March 2019

Mark: Sobresaliente

Candidate: Patricia Enrique Jiménez

Supervisor: Fernando Ania García and Araceli Flores Aguilar-Amat

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: *Confinement of Helium trimers under the adiabatic approach: Study of Efimov states*

Type: Master thesis

University: Facultad de Ciencias Físicas, Universidad Complutense de Madrid

Date: June 2019

Mark: Notable

Candidate: Ignacio C. Lluch Repiso

Supervisor: Eduardo Garrido Bellido

Title: *Hamiltonian Corrections in Loop Quantum Cosmology*

Type: Master thesis

University: Facultad de Ciencias, Universidad Autónoma de Madrid

Date: 8 of July 2019

Mark: Sobresaliente

Candidate: Alejandro García-Quismondo Martín

Supervisor: Guillermo Antonio Mena Marugán

Title: *Effects of electric fields on the surface states of Weyl semimetals*

Type: Master thesis

University: Facultad de Ciencias Físicas, Universidad Complutense de Madrid

Date: June 2019

Mark: Matrícula de Honor

Candidate: Yuriko Caterina Baba

Supervisor: Rafael Alejandro Molina Fernández

Title: Estudio de las correlaciones de corto alcance de espectros incompletos de sistemas cuánticos

caóticos e intermedios

Type: Master thesis

University: Facultad de Ciencias Físicas, Universidad Complutense de Madrid

Date: September 2019

Mark: Matrícula de Honor

Candidate: María Hita Pérez

Supervisor: Rafael Alejandro Molina Fernández

Title: Estudio de las correlaciones de largo alcance en sistemas cuánticos caóticos.

Type: Master thesis

University: Facultad de Ciencias Físicas, Universidad Complutense de Madrid

Date: September 2019

Mark: Sobresaliente

Candidate: Ignacio Casal Iglesias

Supervisor: Rafael Alejandro Molina Fernández

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

Title: Nanotermómetros basados en Nanoestrellas de Plata

Type: Degree thesis

University: Facultad de Ciencias, Universidad Autónoma de Madrid

Date: 6th of June 2019

Mark: Sobresaliente

Candidate: Rosalía López Méndez

Supervisor: Santiago Sánchez Cortés

Title: Intensificación de emisión Raman en ultravioleta mediante aluminio nanoestructurado.

Type: Degree thesis

University: Facultad de Ciencias, Universidad Autónoma de Madrid

Date: 6th of June 2019

Mark: Sobresaliente

Candidate: Daniel Fraile Palos

Supervisor: Santiago Sánchez Cortés

Title: Detection of deethylhydroxyatrazine (DEHA) by surface-enhanced Raman spectroscopy (SERS) and its interactions with humic acids (HAs)

Type: Master thesis

University: University of Bologna (Italy)

Date: 24th of October 2019

Mark: Sobresaliente

Candidate: Giulia Zanasi

Supervisor: Ornella Francioso and Santiago Sánchez Cortés

Title: CEPA4: Ajuste del rango energético con muones

Type: Master thesis

University: Facultad de Ciencias Físicas, Universidad Complutense de Madrid

Date: 16th of September 2019

Mark: Sobresaliente

Candidate: Alejandro Ortiz Cortés

Supervisor: Olof Tengblad and Jose Antonio Briz Monago

Title: Desarrollo de un prototipo con DSSDs para realizar imagen médica con protones

Type: Master thesis

University: Facultad de Ciencias, Universidad de Sevilla

Date: 23rd of September 2019

Mark: Notable

Candidate: M^a Inmaculada Posadillo de Bringas

Supervisor: Olof Tengblad and Jose Antonio Briz Monago

Title: Síntesis de sensores inorgánicos

Type: Degree thesis

University: Facultad de Ciencias, Universidad Autónoma de Madrid

Date: 11th of June 2019

Mark: Sobresaliente

Candidate: Leyre Fernández Inchustza

Supervisor: Sagrario Martínez Ramírez

Title: Simulaciones Montecarlo para el desarrollo de un prototipo de tomógrafo de protones con aplicación en protonterapia

Type: Master thesis

University: Universidad de Sevilla

Date: 23rd of September 2019

Mark: Sobresaliente

Candidate: Vicente García Távora

Supervisor: Enrique Nácher González and Jose Antonio Briz Monago

6.5.4 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

Title: Microrreología de disoluciones de polímeros

Type: Trabajo fin de grado - Degree in Materials Engineering

University: Universidad Rey Juan Carlos

Date: 22nd of November 2019

Mark: Sobresaliente

Candidate: Alejandro Clemente Moral

Supervisor: Juan Francisco Vega and María Teresa Expósito

Capítulo 7

TABLAS Y DATOS

Chapter 7

TABLES AND DATA

7.1 INDICADORES DE PUBLICACIONES Y FORMACIÓN PUBLICATIONS AND TRAINING INDICATORS

	2013	2014	2015	2016	2017	2018	2019
Number of ISI publications	179	187	155	159	148	146	156
Number of non-ISI publications	13	18	16	4	3	2	3
Total stock of PhD fellowships and contracts	22	22	18	16	18	17	19
Number of PhD Theses defended	5	8	7	8	4	4	3
“Créditos” in PhD, MSc and BSc Courses	82,4*	32,9*	88*	89	57,3	87	171

7.2 RESUMEN DE PUBLICACIONES EN REVISTAS JCR-ISI SUMMARY OF PUBLICATIONS IN JCR-ISI-JOURNALS

JOURNAL	IMPACT FACTOR (JCR -2018)	NUMBER OF PAPERS
Advanced Functional Materials	15.621	1
Nano Energy	15.548	1
Nano Letters	12.279	1
Nature Communications	11.878	2
Chemical Science	9.556	1
Optica	9.263	1
Physical Review Letters	9.227	8
Astrophysical Journal, Supplement Series	8.311	1
ACS Photonics	7.143	1
ACS Sustainable Chemistry and Engineering	6.970	2
Nanoscale	6.970	1
Nanophotonics	6.908	1
Composites Science and Technology	6.309	1
Astronomy and Astrophysics	6.209	2
Macromolecules	5.997	3
Journal of High Energy Physics	5.833	1
Astrophysical Journal	5.580	1
Journal of Cosmology and Astroparticle Physics	5.524	2
Monthly Notices of the Royal Astronomical Society	5.231	3
Applied Surface Science	5.155	3
Physical Review D	4.368	4
Journal of Physical Chemistry C	4.309	3
International Journal of Molecular Sciences	4.183	1
Physics Letters, Section B	4.162	8
Frontiers in Plant Science	4.106	1
Dalton Transactions	4.052	2
Nanomaterials	4.034	2
Scientific Reports	4.011	2
Polymer	3.771	2
Physical Review B	3.736	4

Langmuir: the ACS journal of surfaces and colloids	3.683	1
Physical Chemistry Chemical Physics	3.567	6
Journal of Physics G: Nuclear and Particle Physics	3.534	1
Organic Electronics	3.495	1
Classical and Quantum Gravity	3.487	3
Analytical and Bioanalytical Chemistry	3.286	1
Polymers	3.164	1
Physical Review C	3.132	18
New Journal of Chemistry	3.069	1
Molecules	3.060	1
RSC Advances	3.049	4
Materials Letters	3.019	1
Journal of Chemical Physics	2.997	2
Polymer Testing	2.943	1
Spectrochimica Acta - Part A	2.931	1
Journal of Physics D - Applied Physics	2.829	1
Journal of Raman Spectroscopy	2.809	3
Journal of Physics and Chemistry of Solids	2.752	1
Journal of physics-Condensed matter	2.711	1
Molecular Systems Design and Engineering	2.708	1
The journal of physical chemistry A	2.641	4
European Physical Journal Plus	2.612	1
ACS Omega	2.584	2
European Physical Journal A	2.481	1
Inorganica Chimica Acta	2.433	1
Journal of Applied Physics	2.328	4
ACS Earth and Space Chemistry	2.243	1
Polymers for Advanced Technologies	2.162	1
Physica Scripta	2.151	1
International Journal of Concrete Structures and Materials	2.111	1
Physics Letters, Section A	2.087	1
Journal of Sol-Gel Science and Technology	1.986	1
Surface Science	1.849	1
European Physical Journal E	1.686	1
Theoretical Chemistry Accounts	1.598	1
Molecular Physics	1.571	1
Materials Research Express	1.449	1
Nuclear Instruments & Methods in Physics Research Section A	1.433	1
Journal of Thermoplastic Composite Materials	1.343	1
International Journal of Geometric Methods in Modern Physics	1.022	1
Few-Body Systems	0.874	1
Acta Physica Polonica B	0.609	1
Emerging Materials Research	0.330	1
Physical Review Research		2
Advanced Theory and Simulations		1
Fluids		1
Nanoscale Advances		1
Nuovo Cimento della Societa Italiana di Fisica C		3
SN Applied Sciences		1
EPJ Web of Conferences		1
TOTAL:		Average Impact Factor: 4,31
		156

7.3 EVOLUCIÓN DEL ÍNDICE DE IMPACTO (REVISTAS JCR-ISI) POR DEPARTAMENTOS / *EVOLUTION OF THE IMPACT FACTOR (JCR-ISI-JOURNALS) BY DEPARTMENTS*

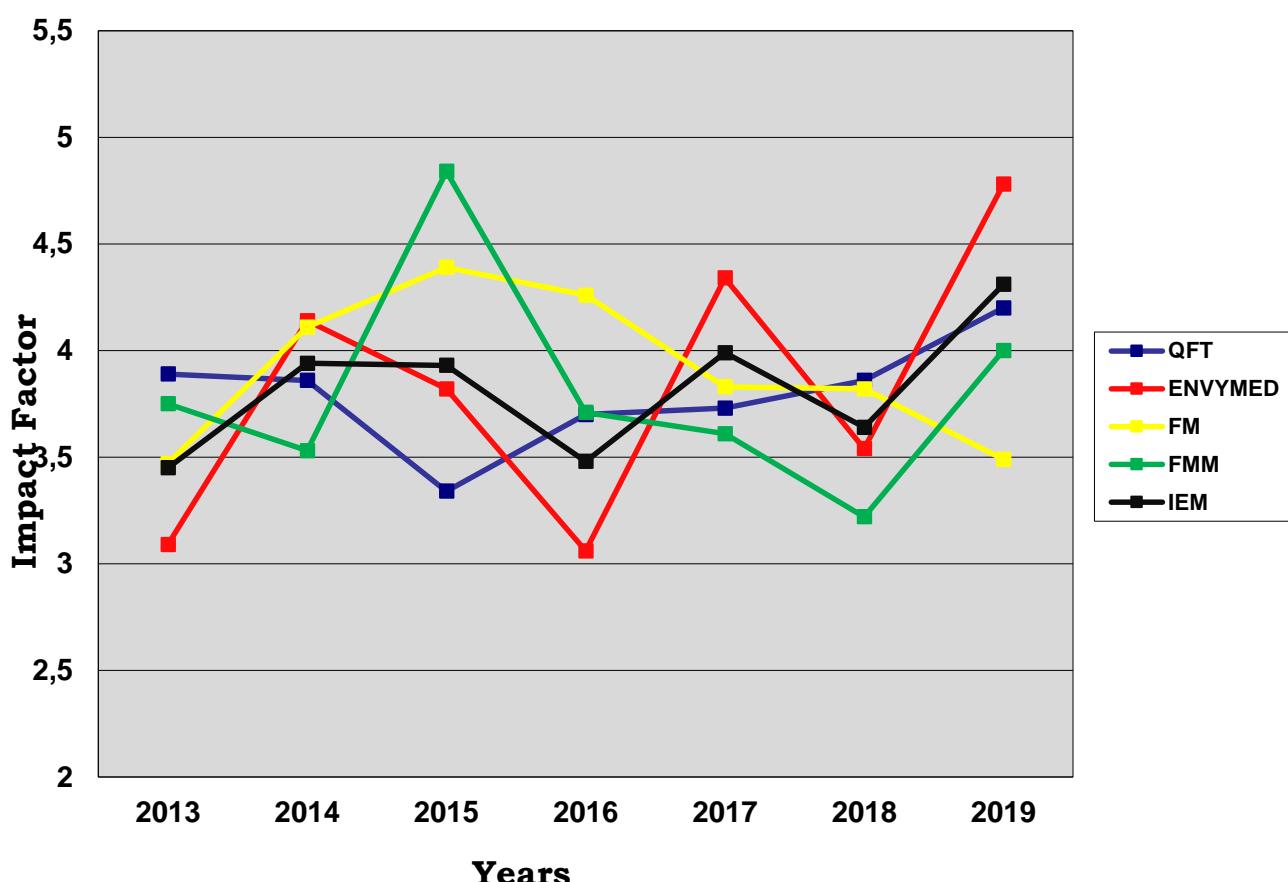
Department Key:

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”		Adjoint Researchers		Rest of the Scientific Personnel ¹		Support Staff		Total		
	M	F	M	F	M	F	M	F	M	F	M	F	TOTAL
QFT	8	1			1		3	1			12	2	14
ENVYMED	6	4		1		2	6	2	1	1	13	10	23
FM	10	2			1		3		2	1	16	3	19
FMM	5	5			1		2	1	1	1	9	7	16
ADMON.									2	9	2	9	11
IEM	29	12		1	3	2	14	4	6	12	52	31	83

¹“Authorized Stay” excluded

(M: Male, F: Female. See also the “Department Key” in section 7.3)

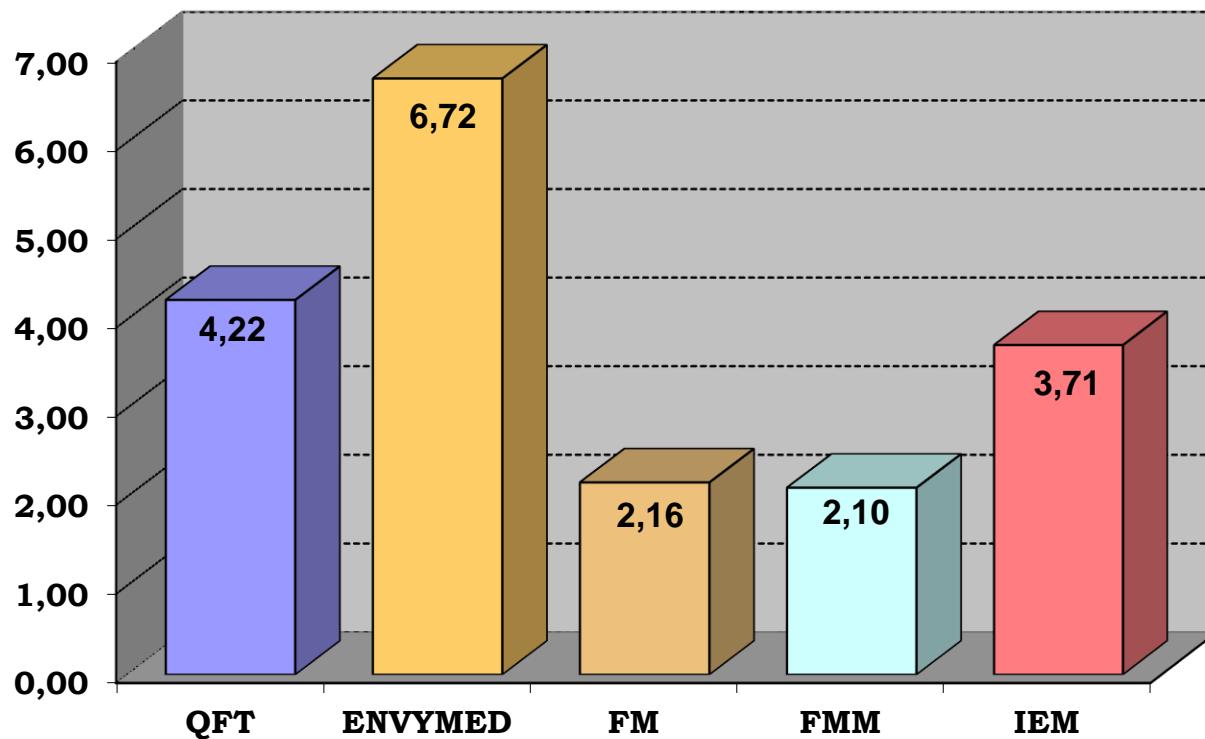
Personal del IEM sin incluir Doctores Vinculados / Personnel of the IEM excluding the Adjoint Researchers: 80

7.5 NÚMERO DE PUBLICACIONES POR DEPARTAMENTOS NUMBER OF PAPERS BY DEPARTMENTS

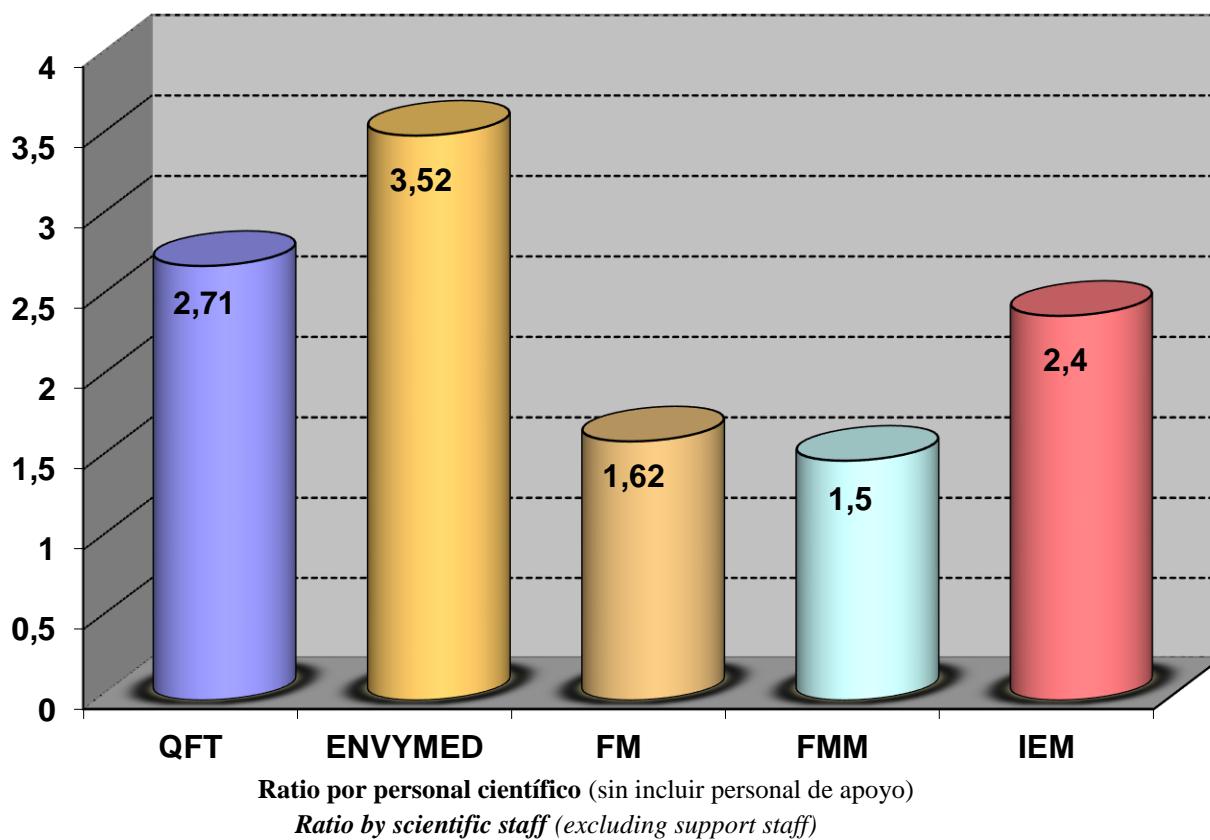
	QFT	ENVYMED	FM	FMM	IEM
ISI publications	38	73 (+1)¹	24 (+2)¹	21	156
Other publications	2	1			3

¹In parenthesis, papers shared with other Departments.

7.6 RATIO DE PUBLICACIONES JCR-ISI POR DEPARTAMENTOS RATIO OF JCR-ISI PUBLICATIONS BY DEPARTMENTS



Ratio por investigador SENIOR (personal de plantilla más contratados “Ramón y Cajal”)
Ratio by senior researcher (staff plus “Ramón y Cajal”)



Ratio por personal científico (sin incluir personal de apoyo)
Ratio by scientific staff (excluding support staff)

- Ratio de publicaciones ISI del IEM por personal investigador senior (plantilla): 3,80
Ratio of ISI publications of IEM per senior staff researcher

SUMARIO

Introducción	2
<i>Introduction</i>	3
1. Estructura del Instituto / Structure of the Institute	4
Dirección / Direction	5
Junta de Instituto / Institute Board	5
Claustro Científico / Scientific Staff.....	5
Departamentos de Investigación / Research Departments	6
Dpto. de Química y Física Teóricas / Theoretical Physics and Chemistry	6
Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados / Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy	7
Dpto. de Física Molecular/ Molecular Physics	8
Dpto. de Física Macromolecular/ Macromolecular Physics	9
Unidad de Gestión Económica-Administrativa / Financial and Administrative Office	10
Servicios del Centro de Física Miguel A. Catalán / Service Units of the Center of Physics CFMAC	10
2A. Labor Investigadora	11
2A.1 Dpto. de Química y Física Teóricas.....	12
2A.2 Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados.....	19
2A.3 Dpto. de Física Molecular.....	30
2A.4 Dpto. de Física Macromolecular.....	36
2B. Research Activities.....	42
2B.1 Theoretical Physics and Chemistry Department	43
2B.2 Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy Department.....	50
2B.3 Molecular Physics Department	60
2B.4 Macromolecular Physics Department	66
3. Proyectos de Investigación / Research Grants	71
3.1 Dpto. de Química y Física Teóricas / Theoretical Physics and Chemistry.....	72
3.2 Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados / Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy	73
3.3 Dpto. de Física Molecular / Molecular Physics.....	76
3.4 Dpto. de Física Macromolecular / Macromolecular Physics	76

4. Cooperación Científica / Scientific Cooperation	78
4.1 Congresos y Reuniones / Congresses and Meetings.....	79
4.1.1 Dpto. de Química y Física Teóricas / Theoretical Physics and Chemistry.....	79
4.1.2 Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados / Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy	81
4.1.3 Dpto. de Física Molecular / Molecular Physics.....	83
4.1.4 Dpto. de Física Macromolecular / Macromolecular Physics	84
4.2 Estancias de Investigadores en el Instituto / Visitors	85
4.2.1 Dpto. de Química y Física Teóricas / Theoretical Physics and Chemistry.....	85
4.2.2 Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados / Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy	85
4.3 Conferencias de Investigadores Invitados / Invited Researches Conferences.....	86
4.3.1 Dpto. de Química y Física Teóricas / Theoretical Physics and Chemistry.....	86
4.3.4 Dpto. de Física Macromolecular / Macromolecular Physics	87
4.4 Visitas de Investigadores a Centros Internacionales / Visits to Foreing Institutions	87
4.4.1 Dpto. de Química y Física Teóricas / Theoretical Physics and Chemistry.....	87
4.4.2 Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados / Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy	87
4.4.3 Dpto. de Física Molecular / Molecular Physics.....	88
5. Labor Docente, Difusión de la Ciencia y Otras Actividades / Teaching, Outreach, and Other Activities	89
5.1 Docencia / Teaching	90
5.1.1 Dpto. de Química y Física Teóricas / Theoretical Physics and Chemistry.....	90
5.1.2 Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados / Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy	91
5.1.3 Dpto. de Física Molecular / Molecular Physics.....	91
5.1.4 Dpto. de Física Macromolecular / Macromolecular Physics	92
5.2 Cursos, Conferencias y Seminarios / Courses, Conferences and Seminars	92
5.2.1 Dpto. de Química y Física Teóricas / Theoretical Physics and Chemistry	92
5.2.2 Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados / Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy	93
5.2.3 Dpto. de Física Molecular / Molecular Physics	94
5.2.4 Dpto. de Física Macromolecular / Macromolecular Physics	95
5.3 Premios y Otros Méritos / Awards.....	95
5.3.1 Dpto. de Química y Física Teóricas / Theoretical Physics and Chemistry.....	95
5.3.2 Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados / Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy	95
5.3.3 Dpto. de Física Molecular / Molecular Physics	96
5.3.4 Dpto. de Física Macromolecular / Macromolecular Physics	97

5.4 Actividades y Material de Divulgación / Outreach Activities and Material	97
5.4.1 Dpto. de Química y Física Teóricas / Theoretical Physics and Chemistry	97
5.4.2 Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados / Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy	98
5.4.3 Dpto. de Física Molecular / Molecular Physics.....	99
5.4.4 Dpto. de Física Macromolecular / Macromolecular Physics	100
5.5 Transferencia de Tecnología / Transfer of Technology	101
5.5.2 Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados / Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy	101
5.5.4 Dpto. de Física Macromolecular / Macromolecular Physics	101
5.6 Unidades Asociadas y Otras Actividades / Associated Units and Other Activities	102
5.6.1 Dpto. de Química y Física Teóricas / Theoretical Physics and Chemistry	102
5.6.2 Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados / Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy	103
5.6.3 Dpto. de Física Molecular / Molecular Physics.....	103
5.6.4 Dpto. de Física Macromolecular / Macromolecular Physics.....	103
6. Publicaciones y Producción Científica / Publications and Scientific Production.....	104
6.1 Publicaciones en Revistas y Proceedings ISI / ISI Publications	105
6.1.1 Dpto. de Química y Física Teóricas / Theoretical Physics and Chemistry	105
6.1.2 Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados / Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy	107
6.1.3 Dpto. de Física Molecular / Molecular Physics.....	115
6.1.4 Dpto. de Física Macromolecular / Macromolecular Physics.....	117
6.2 Publicaciones en Revistas No JCR-ISI / Non JCR-ISI Publications.....	119
6.2.1 Dpto. de Química y Física Teóricas / Theoretical Physics and Chemistry.....	119
6.2.2 Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados / Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy	120
6.3 Libros, Monografías y otras Publicaciones de Proceedings / Books, Proceedings, and Other Publications	120
6.3.2 Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados / Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy	120
6.3.3 Dpto. de Física Molecular / Molecular Physics.....	120
6.3.4 Dpto. de Física Macromolecular / Macromolecular Physics	120
6.4 Tesis Doctorales / PhD Theses.....	121
6.4.3 Dpto. de Física Molecular / Molecular Physics.....	121
6.4.4 Dpto. de Física Macromolecular / Macromolecular Physics.....	121

6.5 Trabajos de Máster, Grado y Otras Titulaciones / Master, Grade and Other Degrees Theses ...	121
6.5.1 Dpto. de Química y Física Teóricas / Theoretical Physics and Chemistry	121
6.5.2 Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados/ Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy	122
6.5.4 Dpto. de Física Macromolecular / Macromolecular Physics	123
7. Tablas y Datos / Tables and Data	124
7.1 Datos comparativos con las previsiones del Plan Estratégico / Data compared to expectations from the Strategic Plan	125
7.2 Resumen de publicaciones en revistas JCR-ISI / Summary of publications in JCR-ISI journals	125
7.3 Evolución del índice de impacto (revistas JCR-ISI) por Departamentos / Evolution of the impact factor (JCR-ISI-Journals) by Departments	127
7.4 Personal por Departamentos / Personnel by Departments.....	128
7.5 Número de publicaciones por Departamentos / Number of publications by Departments	128
7.6 Ratio de publicaciones JCR-ISI por Departamentos / Ratio of JCR-ISI publications by Departments.....	129