

**INSTITUTO DE
ESTRUCTURA DE LA MATERIA**

**CONSEJO SUPERIOR DE
INVESTIGACIONES CIENTÍFICAS**

**MEMORIA
DE LA LABOR REALIZADA DURANTE EL
AÑO 2010**

ANNUAL REPORT 2010

INTRODUCCIÓN

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

El IEM fue fundado en 1976, con la unión de algunos investigadores en Física de Partículas, Física Molecular, Química Cuántica y Polímeros Cristalinos. Con la llegada de nuevos científicos y con los cambios experimentados por algunas líneas de investigación, las actividades científicas del IEM han ido incluyendo otras áreas como la Física Nuclear, la Espectroscopía Molecular o la Gravitación. Durante 2010, las actividades de investigación han estado organizadas alrededor de cinco Departamentos con grupos experimentales y teóricos cuyos campos científicos abarcan la Física Nuclear, Estadística, Molecular y Macromolecular, la Biofísica, la Física de la Materia Condensada y la Física Gravitacional. Parte de esta investigación utiliza grandes instalaciones nacionales e internacionales. La actividad investigadora se concentra en el área de la Física, aunque con aplicaciones en Química Física y en otras áreas relacionadas.

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

Química y Física Teóricas (QFT),
Física Nuclear y Física Estadística (FNFE),
Física Molecular (FM),
Espectroscopía Vibracional y Procesos Multifotónicos (EVPM),
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 de Reprografía y Conserjería son prestados por el CFMAC y compartidos con los otros Institutos que forman dicho Centro.

La misión del IEM, recogida en su Plan de Actuación para el cuatrienio 2010-2013, 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 internacional en la frontera de la actividad científica representada por la investigación que en él se desarrolla.

Esta actividad científica ha quedado plasmada durante 2010 en más de 170 publicaciones ISI y la consecución de ocho tesis doctorales.

INTRODUCTION

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

The IEM was founded in 1976 with the union of some researchers in Particle Physics, Molecular Physics, Quantum Chemistry and Crystalline Polymers. With the advent of new scientists and the changes experienced by some research topics, the scientific activities of IEM have been including other areas such as Nuclear Physics, Molecular Spectroscopy and Gravitation. During 2010, research activities have been organized around five Departments with experimental and theoretical groups whose scientific fields include Nuclear Physics, Statistics, Molecular and Macromolecular Physics, Biophysics, Physics of Condensed Matter, and Gravitational Physics. Part of this research has involved the use of large national and international facilities. The research activity is concentrated in the area of physics, but with applications in physical chemistry and other related fields.

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

Theoretical Chemistry and Physics (QFT)
Nuclear Physics and Statistical Physics (FNFE)
Molecular Physics (FM)
Vibrational Spectroscopy and Multiphoton Processes (EVPM)
Macromolecular Physics (FMM)

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

The mission of the IEM, as described in its Action Plan for the quadrennium 2010-2013, 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 an international reference institution on the frontier of the scientific activity represented by the research that it develops.

This scientific activity, during 2010, has been shaped over 170 ISI publications and the achievement of eight doctoral theses.

CAPÍTULO 1
ESTRUCTURA DEL INSTITUTO

CHAPTER 1
STRUCTURE OF THE INSTITUTE

DIRECCIÓN / DIRECTION

Director: Dr. Guillermo Antonio Mena Marugán

Vicedirector: Prof. Tiberio Ezquerro Sanz.

Vicedirector: Dr. José M. Fernández Sánchez.

Gerente / Manager: D^a. Pilar Criado Escribano.

JUNTA DE INSTITUTO / INSTITUTE BOARD

Presidente: Dr. Guillermo Antonio Mena Marugán

Secretaria: D^a. Pilar Criado Escribano

Vocales:

Dr. José Carlos Canalda Cámara

Dr. José Luis Doménech Martínez

Prof. Tiberio Ezquerro Sanz

Dr. José M. Fernández Sánchez

Prof. M^a José García Borge

Dr. Eduardo Garrido Bellido

Dr. José González Carmona

D. Miguel Ángel Moreno Alba

Dra. Aurora Nogales Ruiz

Dr. José Antonio Sánchez Gil

CLAUSTRO CIENTÍFICO / SCIENTIFIC STAFF

Presidente: Dr. Guillermo Antonio Mena Marugán

Secretario: Dr. Rafael Molina Fernández

Personal Investigador en plantilla:

Dra. Almudena Alonso Herrero

Dr. Fernando Ania García

Prof. Santiago Arribas Mocoroa

Dr. Jesús Fernando Barbero González

Prof. Francisco Javier Bermejo Barrera

Prof. Dionisio Bermejo Plaza

Dr. Carlos Cabrillo García

Dra. M^a Esperanza Cagiao Escotado

Dra. M^a José Capitán Aranda

Dr. Pedro Carmona Hernández

Dr. Luis Colina Robledo

Dr. Victor Cruz Cañas

Dr. Luis Mariano Díaz Sol

Dr. José Luis Doménech Martínez

Prof. Concepción Domingo Maroto

Prof. Jorge Dukelsky Bercovich

Prof. Rafael Escribano Torres

Prof. Tiberio Ezquerro Sanz

Dr. Ricardo Fernández Perea

Dra. Araceli Flores Aguilar Amat

Dr. José M. Fernández Sánchez

Prof. M^a José García Borge

Dra. M^a Cruz García Gutiérrez

Dr. Eduardo Garrido Bellido

Prof. José González Carmona

Prof. Víctor Herrero Ruiz de Loizaga

Dra. Andrea Jungclaus

Dra. Amelia Linares Dos Santos
Prof. Javier Martínez de Salazar Bascaña
Dr. Raúl Zósimo Martínez Torres
Dra. Belén Maté Naya
Dr. Guillermo Antonio Mena Marugán
Dr. Rafael Molina Fernández
Prof. Salvador Montero Martín
Dra. Aurora Nogales Ruiz
Dr. Juan Ortigoso Martínez
Dra. Mirta Rodríguez Pinilla
Dr. Daniel Reyes Rueda Bravo
Dr. Santiago Sánchez Cortés
Dr. José Antonio Sánchez Gil
Dr. Julio Francisco Santos Gómez
Dra. Magna Santos Greve
Prof. Pedro Sarriguren Suquibide
Dra. M^a Luisa Senent Diez
Dra. Isabel Tanarro Onrubia
Dr. Guzmán Tejeda Gala
Dr. Olof E. I. Tengblad
DR. Juan Francisco Vega Borrego

DEPARTAMENTOS DE INVESTIGACIÓN / RESEARCH DEPARTMENTS

DPTO. 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:

Prof. Jorge Dukelsky Bercovich

Profesor de Investigación / Research Professor (since April 2010)

Prof. Pedro Sarriguren Suquilbide

Profesor de Investigación / Research Professor (since April 2010)

Dr. Jesús Fernando Barbero González

Investigador Científico/ Research Scientist

Dr. Eduardo Garrido Bellido

Investigador Científico / Research Scientist (since April 2010)

Dr. Guillermo Antonio Mena Marugán

Investigador Científico/ Research Scientist

Dra. María Luisa Senent Diez

Investigadora Científica / Research Scientist (since April 2010)

Dr. Rafael Molina Fernández

Científico Titular/ Tenured Scientist (since April 2010)

Dr. José Barea Muñoz

Investigador Contratado JAE-doc/ Postdoc JAE-doc
(until September 2010)

Dra. Natalia Inostroza Pino

Investigadora Contratada MAE-AECID / Postdoc
Contract MAE-AECID

Dr. Gonzalo Olmo Alba

Investigador Contratado JdelaC/ Postdoc Contract JdelaC
(until June 2010)

Dr. Tomasz Henryk Pawlowski

Investigador Contratado I3P/ Postdoc Contract I3P (until September 2010)

Dra. Manuela Rodríguez Gallardo

Investigadora Contratada JAE-doc/ Postdoc JAE-doc

Dr. Rayner Rodríguez Guzmán

Investigador Contratado JAE-doc/ Postdoc JAE-doc

Dr. Javier Rodríguez Vignote

Investigador Contratado JdelaC /Postdoc Contract
JdelaC

Dr. Pablo San José Martín

Investigador Contratado JAE-doc/Postdoc JAE-doc

Dr. Mariano Sánchez Castellanos

Investigador Contratado CONACYT / Postdoc Contract
CONACYT

Dra. Rosa Domínguez Gómez

Doctora Vinculada / Adjoint Researcher

Dr. Carlos Esebbag Benchimol

Doctor Vinculado / Adjoint Researcher

Dr. Luis Garay Elizondo
Profa. Elvira Moya Valgañón (de Guerra)
Dr. Eduardo Jesús Sánchez Villaseñor
D. Mikel Fernández Méndez

D. Daniel Huerga Gómez
Dña. Mercedes Martín Benito

D. Daniel Martín de Blas
D. Javier Olmedo Nieto
Dña. Carolina Romero Redondo
Dña. Esther Vicente Torrico
D. Raúl de Diego Martínez
Dr. Gil Jannes

Dr. Óscar Moreno Díaz

Doctor Vinculado/ Adjoint Researcher
Doctora Vinculada / Adjoint Researcher
Doctor Vinculado/ Adjoint Researcher
Becario Predoctoral JAE / PhD Fellowship JAE (since October 2010)
Becario Predoctoral FPI/ PhD Fellowship FPI
Becaria Predoctoral I3P/ PhD Fellowship I3P (until November 2010)
Becario Predoctoral JAE / PhD Fellowship JAE
Becario Predoctoral JAE/ PhD Fellowship JAE
Becaria Predoctoral I3P / PhD Fellowship I3P
Becaria Predoctoral JAE / PhD Fellowship JAE
Autorizado Permanencia / Authorized Stay
Autorización de permanencia/Authorized stay (until September 2010)
Autorizado Permanencia / Authorized Stay

DPTO. DE FÍSICA NUCLEAR Y FÍSICA ESTADÍSTICA / NUCLEAR PHYSICS AND STATISTICAL PHYSICS

Jefe del Departamento / Head of Department:

Profa. M^a José García Borge

Profesora de Investigación / Research Professor

Personal Científico / Research Staff:

Prof. Javier Bermejo Barrera
Prof. Olof Erik Tengblad
Dr. Carlos Cabrillo García
Dra. Andrea Jungclaus
Dr. Ricardo Fernández Perea
Dr. Enrique Nácher González

Dr. José Sánchez del Río Sáez
Dra. Francesca Zocca

D. Martín Alcorta Moreno

D. Andrés Illana Sisón

Dr. Riccardo Orlandi

D. Vicente Pesudo Fortes

D. Carlos Cruz de la Torre

D. José Antonio Briz Monago
D. Mariano Carmona Gallardo
D. Mario Alberto Cubero Campos

D. Ricardo Domínguez Reyes

D. Guillermo Ribeiro Jiménez

D. Ángel Perea Martínez
Dña. Jennifer Walker

Profesor de Investigación / Research Professor
Profesor de Investigación / Research Professor
Investigador Científico / Research Scientist
Investigadora Científica / Research Scientist
Científico Titular / Tenured Scientist
Titulado Superior Especializado / Specialized University Graduate (since September 2010)
Investigador Contratado / Postdoc Contract
Investigadora Contratada / Postdoc Contract (since May 2010)
Titulado Superior contratado / University Graduate (until March 2010)
Titulado Superior contratado / University Graduate (since November 2010)
Titulado Superior contratado / University Graduate (since June 2010)
Titulado Superior contratado / University Graduate (since November 2010)
Titulado Medio contratado / Tecnician CPAN (until the 30th of September 2010)
Becario Predoctoral-FPI / PhD Fellowship-FPI
Becario Predoctoral JAE / PhD Fellowship JAE
Becario Predoctoral- CSIC-Costa Rica / PhD Fellowship CSIC-Costa Rica.
Becario Predoctoral-I3P / PhD Fellowship-I3P (until the 30th of September 2010)
Becario Predoctoral-FPI / PhD Fellowship-FPI (since September 2010)
Técnico Especializado G. Medio / Technician
Autorizada Permanencia / Authorized Stay

Personal de apoyo / Support Staff:

Dña. Purificación Corchete Corchete

Ayudante de Investigación / Research Assistant

DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS

Jefe del Departamento / Head of Department:

Dr. José Luis Doménech Martínez

Investigador Científico / Research Scientist

Personal Científico / Research Staff:

Prof. Dionisio Bermejo Plaza

Profa. Concepción Domingo Maroto

Prof. Rafael Escribano Torres

Prof. Víctor José Herrero Ruiz de Loizaga

Prof. Salvador Montero Martín

Dr. José María Fernández Sánchez

Dra. Isabel Tanarro Onrubia

Dr. Raúl Zósimo Martínez Torres

Dra. Belén Maté Naya

Dr. Juan Ortigoso Martínez

Dr. Julio Francisco Santos Gómez

Dr. Guzmán Tejeda Gala

Dra. Mirta Rodríguez Pinilla

Dra. Esther Carrasco Burgos

Dr. Óscar Gálvez González

Dra. Yamilet Rodríguez Lazcano

Dr. Luis Rubio Lago

Dña. María Encina López Arias

D. Miguel Jiménez Redondo

D. Javier Rodríguez Azañedo

Profesor de Investigación / Research Professor

Profesora de Investigación / Research Professor

Profesor de Investigación / Research Professor

Profesor de Investigación / Research Professor

Profesor de Investigación / Research Professor

Investigador Científico / Research Scientist

Investigadora Científica / Research Scientist

Científico Titular / Tenured Scientist

Científica Titular / Tenured Scientist

Científico Titular / Tenured Scientist

Científico Titular / Tenured Scientist

Científico Titular / Tenured Scientist

Investigadora Contratada-RyC / Postdoc Contract-RyC

Investigadora Contratada JdC / Postdoc Contract JdC (since April 1st, 2010)

Investigador Contratado-JAE / Postdoc Contract-JAE (until November 30th 2010). Investigador contratado RyC / Post-doc Contract-RyC (since December 1st, 2010)

Investigadora Contratada JAE/ Postdoc Contract JAE (since September 15th, 2010)

Investigador Contratado-JAE UA / Postdoc Contract-JAE UA

Becaria Predoctoral-UA / PhD Fellowship-UA

Autorizado Permanencia / Authorized Stay

Autorizado Permanencia / Authorized Stay

Personal de apoyo / Support Staff:

D. José Manuel Castillo de Pedro

Dña. María José Malagón Sisto

D. Miguel Ángel Moreno Alba

D. David Pérez Risco

Dña. Teresa Cueto Senra

Técnico Especializado G. Medio OPI / Technical Specialist OPI (until December 9th, 2010)

Ayudante de Investigación OPI / Research Assistant OPI

Ayudante de Investigación / Research Assistant OPI

Ayudante de Investigación / Research Assistant OPI

Titulada Superior Contratada JAE-Tec / Technician

Contract JAE-Tec (since September 16th, 2010)

DPTO. DE ESPECTROSCOPIA VIBRACIONAL Y PROCESOS MULTIFOTÓNICOS / VIBRATIONAL SPECTROSCOPY AND MULTIPHOTON PROCESSES

Jefe del Departamento / Head of Department:

Dr. José A. Sánchez Gil

Investigador Científico / Research Scientist

Personal Científico / Research Staff:

Prof. José V. García Ramos

Dr. Pedro Carmona Hernández

Dr. Santiago Sánchez Cortés

Dr. Luís Díaz Sol

Dra. Sagrario Martínez Ramírez

Dra. Magna Santos Greve

Dra. M^a Vega Cañamares Arribas

Dr. Fernando López-Tejeira Sagües

Dra. Lorena Roldán

Dra. Isabel Sánchez Alonso

Profesor de Investigación / Research Professor

Investigador Científico / Research Scientist

Investigador Científico / Research Scientist

Científico Titular / Tenured Scientist

Científica Titular / Tenured Scientist

Científica Titular / Tenured Scientist

Investigadora Contratada JAE/ Posdoc Contract JAE

Investigador Contratado / Posdoc Contract

Investigadora Contratada Postdoctoral MAE-AECI /

Posdoc Contract MAE-AECI

Investigadora Contratada JdC/ Posdoc Contract JdC

Profa. Juana Bellanato Fontecha

Dra. Marina Molina Santos

Dra. Paz Sevilla Sierra

Dña. Raquel de Llanos Bravo

Dña. Elena del Puerto Nevado

Dña. Irene Izquierdo Lorenzo

D. Rogelio Rodríguez Oliveros

D. Ramón Paniagua Domínguez

Dña. Adianez García Leis

Profesora de Investigación Emérita/ Emeritus Research Professor

Doctora Vinculada / Adjoint Researcher

Doctora Vinculada / Adjoint Researcher

Becaria Predoctoral-FPI / PhD Fellowship-FPI

Becaria Predoctoral-JAE-UA / PhD Fellowship-JAE-UA

Becaria Predoctoral- JAE / PhD Fellowship-JAE

Becario Predoctoral-FPI / PhD Fellowship-FPI

Becario Predoctoral-JAE / PhD Fellowship-JAE

Estancia predoctoral CSIC-Cuba / Predoctoral Stay CSIC-Cuba

Personal de apoyo / Support Staff:

Dña. María Luisa López Gil

D. Eduardo López Tobar

Ayudante de Investigación / Research Technician

Contratado Técnico-JAE / Technician-JAE

DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

Jefe del Departamento / Head of Department:

Dra. Aurora Nogales Ruíz

Investigadora Científica / Research Scientist

Personal Científico / Research Staff:

Prof. Tiberio A. Ezquerro Sanz

Prof. Javier Martínez de Salazar Bascuñana

Dr. Daniel R. Rueda Bravo

Dr. Fernando Ania García

Dra. María Esperanza Cagiao Escotado

Dra. María José Capitán Aranda

Dr. Victor Cruz Cañas

Dra. Araceli Flores Aguilar-Amat

Dra. M^a Cruz García Gutiérrez

Dra. Amelia Linares Dos Santos

Dr. Juan Francisco Vega Borrego

Dr. Francisco Javier Ramos Díaz

Dr. Alejandro Sanz Parras

Prof. Francisco José Baltá Calleja

Dra. Carmen Arribas Arribas

D. Juan Felipe Franco González

D. Jaime Javier Hernández Rueda

Profesor de Investigación / Research Professor

Profesor de Investigación / Research Professor

Investigador Científico / Research Scientist

Científico Titular / Tenured Scientist

Científica Titular / Tenured Scientist

Científica Titular / Tenured Scientist

Científico Titular / Tenured Scientist

Científica Titular / Tenured Scientist

Científica Titular / Tenured Scientist

Científica Titular / Tenured Scientist

Científico Titular / Tenured Scientist

Investigador Contratado -I3P / Postdoc Contract-I3P

Investigador Contratado JAE Postdoctoral / Postdoc JAE

Profesor vinculado “ad honorem” / Emeritus Professor

Doctora Vinculada / Doctor in Vinculum

Becario Predoctoral-FPI / PhD Fellowship-FPI

Becario Predoctoral-FPI / PhD Fellowship-FPI (till 30/09)

Becario Predoctoral / PhD Fellowship

Becario Predoctoral JAE / PhD Fellowship-JAE

Becaria Predoctoral -I3P / PhD Fellowship-I3P

Becaria Predoctoral-FPI / PhD Fellowship-FPI

Autorizada Permanencia / Authorized Stay

Autorizada Permanencia / Authorized Stay

Autorizada Permanencia / Authorized Stay

Becario JAE-Intro (1st of August-30th of September 2010)

D. Ignacio Martín-Fabiani Carrato

D. Daniel Martínez Tong

Dña. Nuria Robledo Álvaro

Dña. Sara Sanmartín Sánchez

Dña. Marianella Hernández Santana

Dña. Fátima Montero Sánchez

Dña. Almudena Ochoa Mendoza

D. Ernesto Vicente Alique

Personal de apoyo / Support Staff:

Dr. José Carlos Canalda Cámara

Titulado Superior Especializado / Specialized University Graduate

D. Rafael Núñez Ramírez

Titulado Superior Especializado / Specialized University Graduate

Dña. Ana M. Montero Cuellar

Ayudante de Investigación / Research Assistant

UNIDAD DE GESTIÓN ECONÓMICA-ADMINISTRATIVA / FINANCIAL AND ADMINISTRATIVE OFFICE

Dña. Pilar Criado Escribano
Dña. M^a Teresa Burriel Barceló
Dña. Purificación Díez Rodríguez
Dña. Ana María García Arribas
Dña. M^a Carmen García Collado
Dña. Isabel Lombán Botello
Dña. Concepción Nieto Serrano
Dña. Rosa Cecilia Sparrow Avila

Dña. Susana Esteban Serrano
Dña. Eva Sánchez García

Gerente / Manager
Técnico Especialista de Grado Medio OPI's [CFMAC]
Administrativo Cuerpo General Administración Estado
Ayudante de Investigación /Research Assistant
Cuerpo General Auxiliar Administración del Estado
Auxiliar Organismos Autónomos Administrativo
Cuerpo Técnico Auxiliar de Informática
Técnico Superior de Gestión y Servicios Comunes JAE
(Adscrita a Dirección)
C. Auxiliares Postales y de Telegrafos
Técnico Superior de Gestión y Servicios Comunes JAE

SERVICIOS DEL CENTRO DE FÍSICA MIGUEL ANTONIO CATALÁN / SERVICES OF THE CENTER OF PHYSICS CFMAC

ALMACÉN

Dña. Clara Isabel Cardeñosa García
D. Carlos Jesús Rodríguez Macías

D. Jose Manuel Segura Gonzalez

Administrativo cuerpo General Administración Estado
C. Ejecutivo Postal de Telecomunicaciones (hasta 25 de
Marzo)
C. Auxiliar de Telecomunicaciones

BIBLIOTECA

Dña. Pilar Arangüena Pernas
Dña. Flora Granizo Barrena
Dña. Isabel Delgado Oliva
Dña. Margarita Martínez Álvarez
D. Samuel López Márquez

Técnico Especialista de Grado Medio OPI's
Técnico de Biblioteca y Documentación
Titulado Técnico OPIS
E. Administrativo de Organismos Autónomos
Administrativo

CENTRALITA

Dña. Encarnación García-Alcañiz Fernández

Auxiliar Servicios Generales

CONSERJERÍA

D. Eduardo Balbas Utrillas
Dña. Soledad Moreno Zambrano

Ayudante Gestión y Servicios Comunes
Ayudante Gestión y Servicios Comunes

INFORMÁTICA

D. Luis Dorado González
D. Carlos Meneses Jiménez
D. Francisco Daniel Rincon Fuentes
D. Andres Ubiña Perez

Analista Programador
Técnico Especialista de Grado Medio de OPI's
Técnico Especialista de Grado Medio de OPIS
Técnico Superior de Gestión y Servicios Comunes JAE

MANTENIMIENTO

Dña. Belén Palero Fernández

Ayudante de Investigación OPI's

D. Fernando Pueyo García
D. José María Sanz Pastor

D. José María Torregrosa Perera

Técnico Especialista Grado Medio OPIS
Oficial de Actividades Técnicas y Profesionales (hasta 19
de Enero)
Técnico de Instalación y Equipación

PROYECTOS Y DELINEACIÓN

D. Andrés de Frutos Gómez
D. José Granados Valenzuela

Titulado Técnico Especializado
Ayudante de Investigación

PUBLICACIONES Y REPROGRAFÍA

D. Julián Gil Risco

Oficial Activ. Técnicas y Profesionales

TALLER MECÁNICO

D. Luis Ángel de Prado Serrano
D. Pedro José Peñaranda Martínez

Ayudante de Investigación
Ayudante de Investigación

TALLER ÓPTICO

D. José Lasvignes Pacheco

Técnico Superior de Actv. Técnicas de Mant. Y Profes.

CAPÍTULO 2A
LABOR INVESTIGADORA

2A.1 DPTO. DE QUÍMICA Y FÍSICA TEÓRICAS

LÍNEAS DE INVESTIGACIÓN:

- Física Teórica: Gravitación.
- Teoría de la Materia Condensada.
- Integrabilidad Cuántica y Modelos Exactamente Solubles.
- Física Nuclear Teórica: Estructura y Reacciones.
- Químico-Física Teórica aplicada a la Astrofísica.

SUBLÍNEAS DE INVESTIGACIÓN:

- Relatividad general clásica y cuántica.
- Gravedad y cosmología cuánticas de lazos.
- Análogos de agujeros negros en materia condensada.
- Métodos computacionales en física gravitacional.
- Sistemas mesoscópicos y fuertemente correlacionados.
- Propiedades electrónicas y elásticas del grafeno.
- Modelos exactamente solubles.
- Cálculos de gran escala en sistemas de baja dimensión.
- Termalización, decoherencia y transiciones de fase cuánticas.
- Campos medios jerárquicos.
- 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 de interés astrofísico y atmosférico.
- Colisiones inelásticas no reactivas a bajas temperatura.

TÉCNICAS UTILIZADAS:

- o Física teórica y matemática.
- o Métodos computacionales.
- o Métodos de grupo de renormalización.
- o Métodos de campo medio autoconsistente.
- o Métodos numéricos para la resolución de las ecuaciones de Faddeev en el espacio de coordenadas.
- o Desarrollo adiabático en hiperarmónicos esféricos.
- o Métodos ab initio de alto nivel.

LABOR INVESTIGADORA:

PROPIEDADES ELECTRONICAS Y ELASTICAS DEL GRAFENO

Durante 2010 hemos continuado con la investigación de las propiedades del grafeno. Este material, constituido por una hoja de átomos de carbono con estructura de red exagonal, está despertando en estos momentos gran interés en la comunidad de la física de materia condensada, tanto por las novedades teóricas que representa como por su potencial para aplicaciones tecnológicas. Hemos emprendido diferentes líneas de investigación, dedicadas en particular a entender la influencia de las correlaciones electrónicas y explicar la corrugación intrínseca del grafeno a partir de la interacción entre los grados de libertad electrónicos y elásticos.

Con respecto al estudio de las correlaciones electrónicas, hemos investigado la aparición de una fase con brecha de energía en la teoría de baja energía de cuasipartículas de Dirac con interacción de Coulomb de largo alcance. El caso de la Electrodinámica Cuántica en 2+1 dimensiones proporciona un buen ejemplo de este fenómeno, por el que la simetría quiral $U(N)$ de la teoría con N fermiones de dos componentes de Dirac sin masa se rompe espontáneamente por debajo de un número crítico de especies. Hemos demostrado que, en la aproximación de gran N , una brecha excitónica de energía sólo puede aparecer en la teoría de baja energía del grafeno por debajo de $N = 32/\pi^2$, que es exactamente la mitad del valor encontrado en la Electrodinámica Cuántica para el mismo número de dimensiones. Esto implica que, para el valor físico $N = 4$, el espectro electrónico deba permanecer sin brecha de energía incluso para la mayor intensidad de interacción alcanzada en grafeno suspendido. Este resultado está de acuerdo con el hecho de que no se

haya encontrado evidencia de una transición a un estado aislante en experimentos realizados en muestras suspendidas. En cualquier caso, hemos proporcionado también evidencia de que la simetría quiral debe romperse para valores suficientemente bajos de N , puesto que el parámetro de orden de la transición desarrolla una divergencia para un valor crítico de la interacción en la aproximación de diagramas en escalera. Una predicción natural de nuestro análisis es que la fase con brecha de energía debería aparecer en algún punto entre $N = 4$ y $N = 1$. El grado de libertad de espín se puede por ejemplo congelar por aplicación de un campo magnético, lo que hace plausible la idea de que la transición observada en grafeno en esas condiciones pueda resultar del efecto de ruptura de la simetría quiral. Una comprobación adicional consistiría en ver si, congelando el grado de libertad asociado a los dos conos de Dirac, puede llegar a alcanzarse el estado aislante para valores accesibles de la intensidad de interacción, de acuerdo también con los resultados de nuestro estudio.

Por otra parte, el grafeno puede ser considerado como un prototipo de membrana cristalina electrónica, donde los electrones de conducción están fuertemente acoplados a los fonones de la red bidimensional. Una propiedad notable e inesperada del grafeno es su tendencia a desarrollar ondulaciones, es decir, modulaciones de larga longitud de onda de los desplazamientos verticales, por las que el sistema queda congelado en una configuración arrugada. Estas ondulaciones son una característica importante del grafeno, puesto que se cree que deben tener un efecto significativo en las propiedades de transporte, y su origen ha sido objeto de un debate intenso. En grafeno exfoliado, las ondulaciones están correlacionadas en cierta medida con las irregularidades del sustrato. Pero también se ha visto, sobre todo en experimentos realizados en grafeno suspendido, que pueden surgir en parte como un efecto intrínseco de la membrana cristalina.

En nuestro trabajo nos hemos concentrado en el comportamiento del grafeno como membrana electrónica para investigar la inestabilidad que subyace a tales ondulaciones. Una observación fundamental es que los estudios de membranas más convencionales han mostrado que éstas tienen en general una fase plana donde la rigidez crece a mayor escala de longitud. Hemos argumentado así que el nuevo factor introducido por el grafeno, los electrones de conducción, debe jugar un papel importante en el mecanismo de formación de las ondulaciones. Dentro del marco de la teoría cuántica de muchos cuerpos, hemos diseñado una aproximación auto-consistente complementada con un método de grupo de renormalización para evaluar la contribución de los electrones a las correcciones de auto-energía de los fonones. El carácter no-perturbativo de este método de cálculo nos ha permitido encontrar un valor crítico del acoplo electrón-fonón para el que la rigidez de doblado efectiva de la membrana se anula. Este efecto tiene lugar a temperatura cero y corresponde por tanto a la transición a un nuevo estado fundamental del sistema, caracterizado por la ruptura espontánea de la simetría de traslación de la membrana plana. Hemos demostrado que este fenómeno sigue un mecanismo similar al responsable de la condensación del bosón de Higgs en la física de partículas elementales, con un parámetro de orden dado en el grafeno por el cuadrado del gradiente del campo de fonón flexural. Los potenciales efectivos de ambos campos cuánticos (el desplazamiento vertical en el grafeno, el campo de Higgs en la física relativista) tienen realmente la misma forma típica de “sombrero mejicano”, que hace que el estado inestable correspondiente a la cima decaiga espontáneamente al rodar al estado de mínima energía con simetría rota (representado por el agregado de ondulaciones en un caso, y por el condensado del campo de Higgs que llena el vacío en el otro). Hemos demostrado que la analogía va incluso más allá, puesto que el grafeno tiene un parámetro de control (la tensión de la membrana) que juega el mismo papel que el cuadrado de la masa para el campo de Higgs, guiando la inestabilidad en una situación de compresión (tensión negativa). Elijiendo valores apropiados de los parámetros, hemos visto que el modelo propuesto predice la existencia de una fase arrugada que es consistente con las observaciones experimentales de las ondulaciones, ilustrando de una nueva forma que el grafeno resulta ser un útil campo de pruebas de conceptos fundamentales de la física teórica.

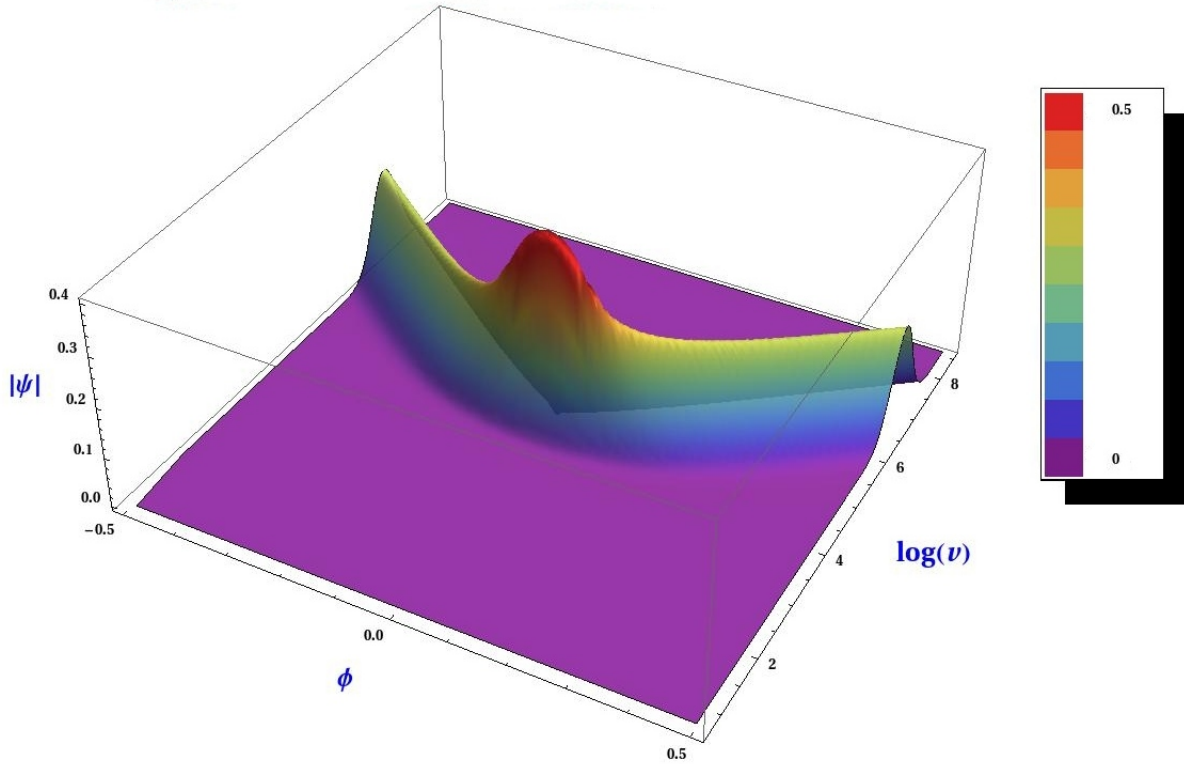
GRAVEDAD CUÁNTICA

Durante el año 2010 hemos continuado con nuestro trabajo sobre la entropía de agujeros negros en gravedad cuántica de lazos, con el objetivo de entender su comportamiento para áreas del horizonte pequeñas. En particular, hemos desarrollado diversos métodos estadísticos que son necesarios para obtener un suavizado del muy complejo espectro de degeneración de los agujeros negros (y su versión integrada que da lugar a la entropía). Las aproximaciones suaves así obtenidas pueden ser utilizadas con éxito para entender el comportamiento de la entropía para áreas grandes. La idea principal consiste en introducir funciones generatrices modificadas obtenidas a partir de las que se han usado con éxito para describir la entropía de los agujeros negros. Estas nuevas funciones están diseñadas para permitir la extracción de la información estadística pertinente (la media y la varianza de la distribución definida por los picos que aparecen en el espectro de degeneración). En la actualidad se ha logrado una comprensión prácticamente completa de la estructura de la entropía como función del área con estos métodos.

En cuanto a nuestro trabajo sobre la cuantización de reducciones de simetría de la relatividad general, hemos completado un artículo para la serie *Living Reviews on Relativity* sobre la cuantización de los modelos de midisuperspacio. Éstos describen reducciones de simetría de la relatividad general con un número infinito de grados de libertad físicos. En contraste con los modelos minisuperspacio más familiares, se trata de teorías de campo genuinas

que, en muchos casos, conservan una invariancia residual bajo difeomorfismos. Por estas razones, este tipo de modelos constituyen un excelente banco de pruebas para probar técnicas de cuantización y desempeñan un papel central en el desarrollo actual de la gravedad y cosmología cuánticas de lazos. Tratándose de un trabajo de revisión, el artículo no proporciona nuevos resultados, sino que más bien da una visión global del campo que tiene en cuenta todos los enfoques sobre el tema. Éstos incluyen tanto los métodos geometrodinámicos más tradicionales como los inspirados en la gravedad cuántica de lazos.

En lo concerniente, específicamente, a la aplicación de las técnicas de cuantización de lazos a tales midisuperespacios, hemos continuado desarrollando la cuantización de las cosmologías de Gowdy que contienen ondas gravitatorias linealmente polarizadas. De hecho, hemos completado su cuantización usando un formalismo híbrido que combina una cuantización de lazos de los modos cero de la geometría con una cuantización de Fock de los modos que describen las inhomogeneidades del campo gravitatorio. Hemos implementado con éxito las nuevas prescripciones para una dinámica mejorada en cosmología cuántica de lazos, determinado la estructura de los sectores de superselección del modelo, probado que el problema de valores iniciales está bien puesto en la teoría cuántica, y encontrado el espacio de Hilbert de estados físicos. Además, hemos llevado a cabo un análisis numérico de la dinámica efectiva correspondiente, mostrando que la singularidad cosmológica (inicial) se evita y es reemplazada por un rebote cuántico. Es más, este escenario de rebote cuántico no se ve afectado cualitativamente por la presencia de inhomogeneidades. También hemos estudiado el comportamiento de los modos inhomogéneos en el proceso del rebote, mostrando que sus amplitudes se conservan estadísticamente, salvo cuando son pequeñas, caso en el que se ven amplificadas por el rebote. Éste es el primer estudio del comportamiento de las inhomogeneidades en un modelo cuantizado por completo, dentro del marco de la cosmología cuántica de lazos.



Rebote cuántico de la función de ondas del universo ψ para un espaciotiempo de Friedmann-Robertson-Walker con campo escalar ϕ . ν corresponde al volumen del universo en unidades de Planck.

La elección de una cuantización de Fock en el formalismo híbrido propuesto se basa en ciertos teoremas de unicidad que hemos demostrado recientemente. Hemos probado que la selección, tanto de una descripción de campos (dentro de la familia de campos relacionados por transformaciones canónicas dependientes del tiempo) como de una representación de Fock para la misma, queda fijada, módulo equivalencia unitaria, si se requiere que el vacío sea invariante bajo las simetrías de las ecuaciones de campo y que la evolución dinámica sea unitaria (en la teoría deparametrizada). Estos teoremas eliminan las ambigüedades de teoría de campos en las predicciones cuánticas, por ejemplo, para campos inhomogéneos en fondos cosmológicos y para perturbaciones cosmológicas entorno a espaciotiempos de Friedmann-Robertson-Walker.

Otra línea de investigación que hemos desarrollado ha sido el estudio de análogos gravitatorios en física de material condensada. Hemos visto que las fluctuaciones de un condensado de Bose-Einstein se pueden describir tanto mediante la teoría de Bogoliubov como mediante una ecuación de Klein-Gordon modificada. Los conceptos de cuasipartícula que se derivan de ambos enfoques coinciden. En una configuración estacionaria que contenga un agujero negro acústico, existen varias elecciones posibles de un vacío regular, incluyendo una generalización regular del vacío de Boulware. La descripción de algunos fenómenos como la radiación de Hawking depende crucialmente de esta elección de vacío. En otro frente distinto, hemos determinado el grado de entrelazamiento de un sistema bipartito Alice-Rob (cuando Rob se halla en las proximidades de un agujero negro de Schwarzschild y Alice se halla cayendo libremente en él) como función de la distancia de Rob al horizonte y de la frecuencia. Todos los fenómenos interesantes ocurren en la vecindad del horizonte de sucesos y su presencia no degrada el entrelazamiento cuando Rob se halla en una zona muy alejada del agujero negro. Por otro lado, el vacío puede evolucionar en un estado entrelazado en un proceso dinámico de colapso. Hemos visto que este entrelazamiento podría alcanzar incluso un grado máximo para frecuencias bajas o para agujeros negros suficientemente pequeños. El colapso gravitatorio proporciona recursos de información cuántica entre los modos en el futuro asintótico (radiación de Hawking) y aquéllos que caen hacia el horizonte. También hemos visto que los fermiones son más sensibles que los bosones a esta generación de entrelazamiento.

MODELOS EXACTAMENTE SOLUBLES

Mediante la solución exacta del modelo $SO(8)$ de pairing neutrón-protón estudiamos la precisión de las aproximaciones de BCS y BCS proyectado en número en sistemas de tamaño finito. Teniendo en cuenta efectos de tamaño finito y resolviendo las ecuaciones de Richardson-Gaudin para sistema de gran tamaño, demostramos que la aproximación de BCS protón-neutrón es exacta en el límite termodinámico.

Estudiamos la realización de pairing onda p del modelo hiperbólico de Richardson-Gaudin que describe sistemas de átomos fríos sin espín. Estos sistemas están caracterizados por una fase topológica, y a diferencia de sistemas en ondas tienen una transición de fase cuántica entre la fase superconductora y la fase de condensado Bose-Einstein de moléculas dipolares. La solución exacta nos permitió establecer que esta transición es de 3° orden e interpretarla como de confinamiento- deconfinamiento a partir de la función de onda exacta.

CAMPOS MEDIOS JERÁRQUICOS

Utilizando la aproximación de Campos Medios Jerárquicos desarrollada por nuestro grupo, estudiamos el modelo de magnetismo cuántico J-Q recientemente propuesto como ejemplo de sistema que posee un punto crítico de deconfinamiento. En nuestra representación del sistema obtenemos una transición de fase de 2° orden entre una fase de Neel y otra de plaquetas en estado singlete contradiciendo previos resultados numéricos y dando inicio a un debate sobre las características de esta transición de fase. Más allá de la interpretación de esta transición de fase, existen discrepancias sobre la magnitud del acoplamiento crítico que difiere en un orden de magnitud en los distintos tratamientos.

CÁLCULOS DE GRAN ESCALA EN SISTEMAS DE BAJA DIMENSIÓN

Hemos estudiado la separación entre los grados de libertad de carga y color en sistemas atrapados de átomos ultrafríos fermiónicos con tres estados hiperfinos diferentes generalizando para estos sistemas el fenómeno de separación carga-espín que aparece en sistemas unidimensionales fuertemente correlacionados. Realizamos simulaciones de gran escala utilizando el algoritmo del grupo de renormalización de la matriz densidad dependiente del tiempo observando las distintas velocidades de evolución de las excitaciones de carga y de color. Exploramos las diferencias entre interacciones atractivas y repulsivas y estudiamos el efecto de la anisotropía de la interacción.

TRANPORTE CUÁNTICO

Calculamos la distribución completa de la conductancia de cables cuánticos desordenados a los que se les aplica un campo dependiente del tiempo periódicamente. Nuestros cálculos se basaron en la teoría de Floquet y en la teoría de escala de la localización. Los efectos del campo en la estadística de la conductancia son muy intensos, especialmente en el límite de alta frecuencia donde la distribución de la conductancia muestra un corte abrupto. En este régimen, la conductancia se puede representar como el producto de un término dependiente de la frecuencia y de un término independiente del campo externo que contiene la información sobre el desorden del sistema. Utilizamos la solución de la ecuación de Mel'nikov para calcular la distribución de la conductancia para una intensidad del desorden arbitraria. Para bajas frecuencias, encontramos que la distribución de la conductancia y las correlaciones de los modos de Floquet se pueden describir mediante la solución de la ecuación de Dorokhov-Mello-Pereyra-Kumar con un número efectivo de canales. En el régimen de localización fuerte, que puede ser inducido bien por el desorden o bien por el campo externo,

la distribución de la conductancia es una distribución log-normal. Verificamos nuestros resultados teóricos numéricamente utilizando el modelo de Anderson.

TERMALIZACIÓN, DECOHERENCIA AND TRANSICIONES DE FASE CUÁNTICAS

Hemos estudiado la dinámica de no equilibrio y la termalización en un sistema de espines en interacción, que transita desde la integrabilidad al caos. El límite integrable se construye a partir del modelo elíptico de Gaudin; la transición hacia el caos se lleva a cabo perturbando el anterior. Los principales resultados obtenidos son: a) el caos cuántico no garantiza la termalización; b) a pesar de que es posible encontrar varias constantes de movimiento en los casos no integrables, la información que almacenan sobre el estado fundamental es menor que en el límite integrable, y c) los mecanismos de termalización son compatibles con la "Hipótesis de Termalización de Autoestados".

VIOLACIÓN DE PARIDAD EN PROCESOS DE DISPERSIÓN DE ELECTRONES POR NÚCLEOS

El conocimiento de las distribuciones de la densidad de neutrones en el núcleo atómico es de una importancia fundamental para entender aspectos básicos de la estructura nuclear. Sin embargo, la información experimental que disponemos en la actualidad sobre estas distribuciones neutrónicas es claramente insuficiente, al contrario de lo que sucede para las distribuciones de carga, para las que se dispone de una amplia información. Profundizar en el conocimiento de las densidades de neutrones en el núcleo es uno de los mayores retos que tiene en la actualidad la investigación de la estructura nuclear. Los progresos realizados en este campo están todavía muy limitados debido a que la principal fuente de información de densidades neutrónicas se basa en experimentos con sondas hadrónicas, sujetas a grandes incertidumbres que surgen del conocimiento impreciso del mecanismo de reacción y a la propia interacción fuerte. Esta situación complicada ha conducido a una reconsideración de las sondas leptónicas para investigar la distribución de neutrones en el núcleo.

Durante el último año hemos investigado una nueva y prometedora posibilidad de medir factores de forma de neutrones a través de las asimetrías generadas como consecuencia de la violación de paridad (PV) en procesos de dispersión elástica de electrones polarizados por núcleos. La interacción electrodébil es bien conocida y puede tratarse perturbativamente por lo que los experimentos en que esta interacción está involucrada son precisos y pueden ser interpretados de una manera fidedigna e independiente del modelo, al igual que sucede con los procesos electromagnéticos. En los procesos de dispersión electrón-núcleo, la violación de paridad surge de la interferencia entre las amplitudes electromagnética y débil (neutra) y se perfila como una herramienta limpia y poderosa para medir la distribución espacial de los neutrones en el núcleo con una precisión sin precedentes.

En nuestro trabajo, los cálculos de estructura nuclear necesarios para evaluar las asimetrías se realizan mediante técnicas de campo medio autoconsistente con interacciones efectivas de tipo Skyrme y correlaciones de apareamiento. Calculamos y discutimos los factores de forma y las densidades isoescalares e isovectoriales tanto para núcleos con $N > Z$ (208Pb) como para núcleos con $N = Z$ (28Si). La mezcla de isospín producida en el estado fundamental de núcleos $N = Z$ por la interacción coulombiana es también evaluada y discutida. Hemos calculado las asimetrías incluyendo la distorsión coulombiana de las funciones de onda de los electrones y las hemos comparado con las correspondientes a un tratamiento en ondas planas. Discutimos asimismo la extracción de la razón entre los factores de forma monopoles de neutrones y protones.

TRANSICIONES DE FORMA EN ISÓTOPOS RICOS EN NEUTRONES

El estudio de la evolución de la forma nuclear en función del número de nucleones es hoy en día un tema de candente actualidad tanto desde el punto de vista teórico como experimental. Especialmente interesantes son las situaciones en las que se produce un cambio drástico de la estructura nuclear entre núcleos vecinos tal y como sucede para isótopos ricos en neutrones de la región de masa en torno a $A=100$. Las variaciones estructurales conllevan en algunos casos cambios súbitos en determinadas propiedades nucleares que pueden utilizarse como auténticas firmas de una transición de forma.

Durante el último año hemos estudiado propiedades globales y espectroscópicas en cadenas de isótopos pares e impares en esa región másica mediante métodos de campo medio autoconsistente de Hartree-Fock-Bogoliubov (HFB) basados en funcionales de la densidad de energía de tipo Gogny con rango finito. Además de la parametrización más conocida de Gogny, D1S, hemos considerado también la más reciente de ellas D1M. Comparando los resultados obtenidos con ambas, hemos evaluado la robustez de los resultados frente a la interacción y hemos podido explorar la capacidad de D1M para reproducir la fenomenología de núcleos impares que todavía no ha sido suficientemente estudiada. La descripción de núcleos impares supone dificultades añadidas dado que el procedimiento de bloqueo del nucleón impar requiere romper la invariancia bajo inversión temporal, haciendo los cálculos más complejos. En nuestro estudio hemos usado la Equal Filling Approximation (EFA), ampliamente usada en cálculos de campo medio para mantener las ventajas que conlleva la invariancia bajo inversión temporal.

Hemos investigado diversas propiedades nucleares sensibles a la forma nuclear, tales como energías de separación de neutrones, radios cuadráticos de carga o asignaciones de spin y paridad en los estados fundamentales. Hemos encontrado firmas muy claras de una transición de forma en torno a $N=60$ tanto en los radios de carga como en el spin-paridad. Estas firmas son robustas, consistentes entre ellas y en buen acuerdo experimental. Llegamos a la conclusión de que un análisis combinado de estos observables podría utilizarse en general para predecir sin ambigüedades nuevas regiones nucleares en las que puedan surgir cambios de forma.

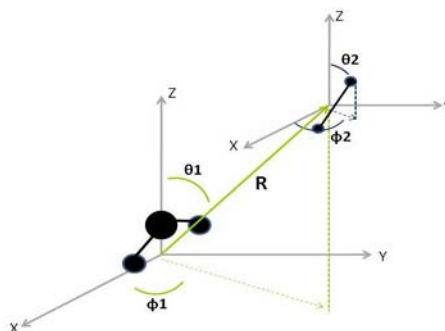
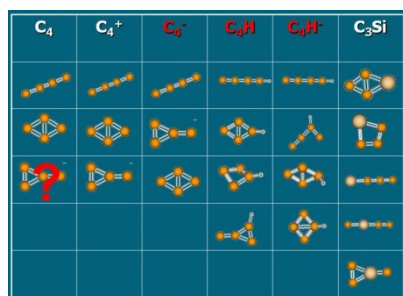
FUNCIONES DE ONDA DEL CONTINUO EN SISTEMAS DE TRES CUERPOS: RESONANCIAS, MODOS DE DESINTEGRACIÓN Y REACCIONES

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

QUÍMICO-FÍSICA TEÓRICA APLICADA A LA ASTROFÍSICA

Durante el año 2010, hemos realizado estudios moleculares clasificables dentro de las tres sub-líneas de investigación que desarrolla el grupo: espectroscopia molecular de moléculas prebióticas no-rígidas de interés astrofísico, caracterización estructural y espectroscópica de especies semi-rígidas de importancia astrofísica y atmosférica y determinación de secciones eficaces en colisiones inelásticas no reactivas a muy bajas temperaturas. En todos estos trabajos, empleamos como herramienta básica el cálculo ab initio de alto nivel para determinar estructuras moleculares y superficies de energía potencial. A partir de estas y de nuestros códigos rovibracionales ENEDIM y FIT-ESPEC predecimos propiedades espectroscópicas. Las moléculas y los problemas que se han tratado son de interés para el estudio de la físico-química en fase gas de los medios interestelar y circunestelar y de las atmósferas planetarias. La investigación se lleva a cabo dentro de los programas de aprovechamiento científico de los nuevos observatorios Herschel y ALMA.

En los últimos años, hemos venido desarrollando estudios muy detallados dirigidos a la caracterización de cadenas carbonadas de importancia astrofísica. Las cadenas carbonadas se consideran relevantes tanto como especies aisladas como intermediarios de reacciones de formación de las grandes moléculas como son los PAHs o los fullerenos. Estudiamos con métodos muy precisos cadenas de pequeño tamaño que son relativamente abundantes en fuentes ricas en carbono. Iniciamos la secuencia de estudio caracterizando cadenas puras tipo C_n con un número reducido de átomos (n) y susceptibles de ser detectadas con técnicas de infrarrojo con los instrumentos del nuevo observatorio espacial Herschel. Actualmente, estamos estudiando cadenas neutras y cargadas tipo C_nX_m ($\text{X}=\text{Si}$, S o H) y tipo SiNH_n . Estas especies, difícilmente tratables a nivel laboratorio por su baja estabilidad, presentan momento dipolar permanente y por lo tanto son detectables mediante radioastronomía. En consecuencia, son especies relevantes de cara al futuro proyecto ALMA. Hemos prestado atención especial a los aniones debido al reciente interés que despiertan en la comunidad astrofísica, estudiando C_4H^- (especie detectada por los astrónomos del IEM) y a los aniones tipo SiC_n y SiC_nH^- . Hemos determinado estructuras isoméricas, superficies de potencial para los primeros electrónicos estados, así como propiedades rovibracionales incluyendo efectos de anarmonicidad. Se prevén posibles canales de isomerización y efectos Renner-Teller y rovibrónicos.



Isómeros de cadenas carbonadas puras y con silicio ; representación espacial del sistema $\text{SO}_2 + \text{H}_2$

De cara a la puesta en marcha de ALMA, es necesario conocer los espectros en las regiones milimétrica y submilimétrica de especies moleculares no-rígidas conteniendo a los elementos interestelares más abundantes C, O N y H. Muchas de estas moléculas se clasifican como prebióticas. Se caracterizan por presentar niveles vibracionales de muy baja energía que pueden estar poblados a muy bajas temperaturas. Estos niveles corresponden a las vibraciones de gran amplitud que inter-transforman estructuras de mínima energía a través de barreras de potencial factibles. Por el interés que despiertan para la astrofísica molecular, estamos estudiando con métodos ab initio muy precisos los movimientos torsionales y de flexión del dimetil-eter y formato de metilo. Recientemente, se ha propuesto como molécula interestelar a la Urea cuyos espectros en la zona del infrarrojo lejano medidos en fase gaseosa están deficitariamente explorados. Llevamos a cabo este trabajo en colaboración con la Universidad de Huelva y la Universidad de Lille.

Finalmente, se ha finalizado el estudio de la colisión a muy bajas temperaturas del SO₂ con para y orto H₂. La determinación de parámetros colisionales entre especies abundantes en fuentes astrofísicas e hidrógeno molecular es fundamental para comprender las intensidades observadas. Estas dependen de las poblaciones de los niveles que, a su vez, son consecuencia de excitaciones y des-excitaciones radiativas y colisionales. Estamos estudiando óxidos de azufre y cadenas carbonadas. Los parámetros se obtienen en cálculos de dinámica molecular que emplean como datos de entrada, superficies de potencial de Van der Waals. Estas se determinan con cálculos ab initio muy precisos. El estudio teórico del SO₂ ha permitido predecir transiciones y un máser motivando nuevas observaciones astrofísicas en las que se ha puesto de manifiesto la veracidad de las predicciones.

2A.2 DPTO. DE FÍSICA NUCLEAR Y FÍSICA ESTADÍSTICA

LÍNEAS DE INVESTIGACIÓN:

- Física Nuclear Experimental.
- Estudio de estados nucleares excitados y resonantes.
- Estudio de la estructura nuclear en reacciones con núcleos exóticos y estables a energías bajas, medias y relativistas.
- Simulaciones por computación usando la herramienta FairRoot para experimentos de física nuclear.
- Sistemas carentes de orden de largo alcance.
- Instrumentación avanzada.

SUBLÍNEAS DE INVESTIGACIÓN:

- Estudios espectroscópicos de núcleos ligeros próximos a la línea de estabilidad nucleónica.
- 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.
- I+D de electrónica multiplexado con regulación en función de cambio de temperatura.
- 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.

TÉCNICAS UTILIZADAS:

- Desintegración beta de núcleos exóticos producidos por el método ISOL, en la instalación ISOLDE y REX-ISOLDE@CERN.
- Reacciones a baja energía en el acelerador de 5MV CMAM@UAM.
- Reacciones a energías relativísticas en el experimento R3B@GSI.
- Simulaciones de Montecarlo utilizando el código GEANT4.
- Diseño mecánicas en SolidWorks.
- Métodos computacionales y Matemáticas.
- Análisis de experimentos en Física Nuclear Experimental.

- o Simulación numérica.
- o Dispersión de neutrones.
- o Técnicas calorimétricas.
- o Medidas de adsorción.

LABOR INVESTIGADORA:

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

A lo largo de los años hemos desarrollado técnicas que nos permiten profundizar sobre los modos de desintegración de núcleos exóticos y, especialmente, sobre la ruptura de estados no ligados. En la memoria de 2003-2009 informábamos del estudio en cinemática completa de las tres alfas provenientes de niveles de ^{12}C poblados a partir de la desintegración β^+ de ^{12}N y β^- de ^{12}B y del estudio de los niveles excitados de baja energía de ^9Be relevantes en el cálculo de la tasa de la reacción $^4\text{He}(\alpha n, \gamma)^9\text{Be}$ alternativa a la de fusión de triple alfa en escenarios estelares ricos en neutrones. En paralelo hemos estudiado la reacción $^{10}\text{B}+^3\text{He}$ cuyos canales a través de ^{12}C y ^9B nos dan información sobre estados no accesibles a la desintegración beta complementando la información sobre la estructura de estos núcleos. Este trabajo está basado en experimentos realizados en la línea de Física Nuclear instalada en el Tandetrón del Centro de Micro Análisis de Materiales (CMAM). Durante 2010 hemos realizado el análisis final de estos experimentos, dando lugar a dos publicaciones; *Breakup of ^{12}C resonances into three alpha particles* (Phys. Rev. C81 (2010) 064313) y *R-matrix analysis of the decays of ^{12}N and ^{12}B* (Phys. Rev. C81 (2010) 024303). También constituye el tema de tesis de nuestro estudiante I3P-CSIC, Martín Alcorta, que defendió su tesis *Nuclear Structure of ^{12}C from 3-Body break-up Studies by light ion reactions in complete kinematics* en abril 2010.

El estudio de partículas cargadas tras la emisión beta es una fuente de información sobre estados excitados y sus modos de desintegración. En esta línea hemos estudiado en ISOLDE (CERN) la desintegración beta de ^{17}Ne . Este es el isótopo más ligero del Neón y presenta emisión de protones y partículas alfa tras la desintegración beta. Los estados intermedios poblados en su desintegración son de gran importancia en el equilibrio estelar tras el proceso CNO. Para la realización del experimento se utilizó el dispositivo experimental *Silicon-Ball* consistente en una estructura semi-esférica de detectores de Silicio de 15 cm de radio. Dicho dispositivo permite utilizar técnicas de tiempo de vuelo que permitirán distinguir las dos cadenas de desintegración presentes, esto es, la cadena beta-p-alfa y la cadena beta-alfa-p. La relación de intensidades de dichas ramas de desintegración así como la población de los niveles de los diferentes núcleos intermedios (^{17}F , ^{16}O , ^{13}N y ^{12}C) son los principales puntos de interés del experimento. Se utiliza la Matriz R para la caracterización de los estados involucrados en la desintegración. Este trabajo junto con el estudio previo realizado sobre los isótopos ligeros de Argón (Phys. Rev. C81 (2010) 024311) constituyen el tema de tesis de Ricardo Domínguez Reyes, que defendió su tesis *Emisión de partículas tras la desintegración β^+ en núcleos deficientes en neutrones: ^{17}Ne , ^{32}Ar y ^{33}Ar* , en diciembre 2010.

La reacción $^4\text{He}(^3\text{He}, \gamma)^7\text{Be}$ es de gran interés astrofísico y una de las principales fuentes de incertidumbre en la determinación de la intensidad del flujo de neutrinos solares que resultan de la desintegración del ^8B proveniente de la reacción $^7\text{Be}(p, \gamma)^8\text{B}$. Además la reacción de interés juega un papel fundamental en la determinación de la abundancia de ^7Li en la naturaleza. La medida de la sección eficaz de dicha reacción, y a partir de ella el factor astrofísico $S_{34}(0)$ constituye por tanto un parámetro de crucial relevancia en los modelos astrofísicos. El experimento realizado en el CMAM a finales de noviembre de 2009 tiene por objetivo la determinación de las secciones eficaces de reacción para energías de laboratorio del haz incidente comprendidas entre los 2.3 y los 5.3 MeV. El ^7Be formado se depositaba en una placa de cobre situada al final de la cámara. Una vez calculados para cada energía los números de átomos tanto de $^3\text{He}^+$ y ^4He como de ^7Be podremos determinar la sección eficaz de reacción a las distintas energías estudiadas, así como los correspondientes factores astrofísicos. Por último mediante extrapolación se determinará el valor del factor astrofísico $S_{34}(0)$. El análisis de este experimento se ha realizado por nuestro estudiante JAE-predoc Mariano Carmona Gallardo presentado para obtener su DEA en junio 2010. En el momento actual se está redactando un artículo sobre los datos obtenidos y preparando nuevas medidas.

ESTUDIO DE LA POLARIZABILIDAD DE NÚCLEOS CON HALO

Uno de los descubrimientos más importantes e inesperados de la Física Nuclear de los últimos años ha sido la existencia de un halo neutrónico en algunos núcleos próximos o en la línea de estabilidad nucleónica (línea de goteo). Un estado de halo es consecuencia de un fenómeno umbral que resulta de la presencia de estados ligados próximos al continuo. La combinación de una energía de enlace pequeña junto con el corto alcance de las fuerzas nucleares permite al nucleón (ó clúster de nucleones) alejarse y tener una probabilidad no despreciable a distancias mucho mayores que el radio nuclear normal ($= r_0 A^{1/3}$, $r_0 = 1.2 \text{ fm}$).

El objetivo de este trabajo era hacer un estudio, experimental y teórico, de la dispersión de los núcleos con halo a energías próximas a la barrera Coulombiana. Nuestro objetivo final es determinar el efecto de polarizabilidad dipolar, que consiste en la distorsión que sufren los núcleos poco ligados durante la colisión debido a los campos eléctricos. Este efecto debe ser particularmente grande en núcleos con halo y se debe manifestar como una reducción de la sección eficaz elástica a ángulos grandes. Este proyecto se lleva a cabo en colaboración con grupos de las Universidades de Sevilla y Huelva con los que tenemos unidades asociadas. Hemos estudiado núcleos con halo de dos neutrones como ^6He , (ver memoria 2006) y en 2008 hemos medido ^{11}Li en TRIUMF (Canadá) y de un neutrón como ^{11}Be en REX-ISOLDE (Eur. Phys. J. A, 2009). El análisis de los datos de TRIUMF está muy avanzado y constituye el trabajo de tesis de nuestro estudiante Mario Cubero (becario del Convenio CSIC – Costa Rica). En julio 2010 se aprobó por el Comité de Expertos de TRIUMF un nuevo experimento para estudiar el comportamiento dinámico de ^{11}Be en plomo en condiciones similares al trabajo realizado con ^{11}Li . La ventaja de este sistema es que al tener un halo de un solo neutrón permite un tratamiento teórico más simple.

ESTUDIO DE LA DESINTEGRACION BETA DEL NÚCLEO $N = Z$ ^{72}Kr

La desintegración beta del núcleo con $N=Z$ ^{72}Kr fue estudiada en ISOLDE (CERN) con “Lucrecia”, un Espectrómetro Gamma de Absorción Total (TAS) con el objetivo de determinar el signo de la deformación a partir de la distribución de fuerza *Gamow-Teller*. El análisis de los datos ha puesto de manifiesto la necesidad de información adicional sobre la competencia de electrones de conversión y emisión gamma en las transiciones de baja energía. Por esta razón, se han realizado medidas complementarias con el fin de determinar los coeficientes de conversión para las transiciones de baja energía en el núcleo hijo, ^{72}Br . De especial interés es la determinación precisa de la vida media del estado isomérico a 101 keV en el ^{72}Br y la multipolaridad de la transición gamma que lo conecta con el estado fundamental puesto que el espín de éste último se ha cuestionado y no está firmemente establecido. Este trabajo ha constituido el tema de investigación de J.A. Briz presentado para obtener su DEA en junio 2010. En este trabajo se han determinado ocho coeficientes de conversión de las transiciones de menor energía lo que permite fijar el spin de los niveles de baja energía de excitación en ^{72}Br , en particular, establecer el spin-paridad del estado fundamental y el isomérico a 101 keV cuyos valores no se conocen bien.

REACCIONES DE TRANSFERENCIA CON HACES DE ISÓTOPOS RADIOACTIVOS RICOS EN NEUTRONES EN REX-ISOLDE, CERN

Las reacciones de transferencia de un nucleón constituyen una herramienta excelente para el estudio de las propiedades de “partícula independiente” de los estados nucleares. En particular, en dichas reacciones se obtienen datos experimentales esenciales para el estudio de la evolución de la estructura de capas, y de las energías efectivas de *single-particle*, lejos de la línea de estabilidad beta. La Dra. A. Jungclaus y el Dr. R. Orlandi, (miembro de nuestro grupo desde junio 2010 que acaba de obtener un contrato de postgrado CPAN que empezó en enero 2011) están involucrados en el estudio de reacciones de transferencia en REX-ISOLDE. En los experimentos realizados se utiliza el acoplamiento de la matriz de detectores de silicio T-REX con los detectores de germanio de MINIBALL. R. Orlandi participó de forma activa en el montaje y en el desarrollo en dos experimentos de este tipo: el estudio del ^{46}Ar , producido en la reacción $^{44}\text{Ar}(t,p)$, y el estudio del ^{79}Zn mediante la reacción $^{78}\text{Zn}(d,p)$, que acontecieron en octubre 2010. Hay que destacar que R. Orlandi fue el portavoz del segundo experimento, liderando una colaboración de más de doce institutos de investigación. Los datos están siendo analizados en Madrid. Los resultados preliminares, que indican que el experimento ha sido satisfactorio, fueron presentados en el *ISOLDE Workshop and User Meeting* en diciembre 2010. En la misma línea, nuestro grupo también lidera una *Letter of intent* para reacciones de transferencia con HIE-ISOLDE, que tendrá lugar en los próximos años.

MEDIDA DE MOMENTOS MAGNÉTICOS MEDIANTE TÉCNICAS DE CAMPOS TRANSITORIOS

La medida de momentos magnéticos de los estados nucleares excitados es de gran interés dado que nos proporciona de forma directa información concerniente a la estructura de los estados que nos interesan, por ejemplo, su función de ondas, y por lo tanto nos permite realizar estrictas pruebas de los diferentes modelos teóricos. Si el estado de interés tiene un tiempo de vida corto, en el rango de los picosegundos, los campos transitorios (“*transient fields*”) intensos tienen que ser empleadas para inducir un efecto medible durante el corto tiempo de interacción entre el momento magnético y el campo magnético.

Esta técnica ha sido utilizada con éxito para medir los momentos magnéticos de los primeros estados excitados 2^+ en los isótopos estables del estaño (así como se discutió anteriormente) en el GSI de Darmstadt. Nuestra estudiante de doctorado Jennifer Walker terminó el análisis de los datos en 2010 y actualmente prepara su tesis doctoral que se defenderá en mayo del 2011, en la Universidad Autónoma de Madrid. Al mismo tiempo, dichos resultados se están preparando para su publicación en *Phys. Rev. C*. Si bien esta técnica de campos transitorios está bien establecida para experimentos con haces de iones estables, los primeros experimentos que los emplean en combinación con haces de iones radiactivos, tanto en baja (bemas ISOL) como en alta (fragmentación) energía, se han realizado sólo desde hace

muy poco tiempo. En 2010, hemos estado trabajando en el diseño de una cámara nueva para las mediciones de factor g con haces radiactivos de baja energía que se utilizarán en 2011 para llevar a cabo el experimento aprobado en REX-ISOLDE para medir el factor g en $^{72,74}\text{Zn}$. Este experimento forma parte de la tesis doctoral de Andrés Illana Sison que empezó a trabajar con nosotros en noviembre del 2010.

Para la realización de una segunda medida aprobada factor g con haces radioactivos, esta vez a energías relativistas en la FRS (GSI en Darmstadt), que se llevará a cabo con el programa de mediciones PRESPEC en 2011, se tuvo que diseñar una segunda cámara nueva el año pasado que incluye un electroimán y refrigeración por nitrógeno líquido.

Asimismo, en octubre de 2010 realizamos un experimento en el acelerador UNILAC del GSI en Darmstadt, Alemania, buscando el estado de simetría mezcla (*mixed symmetry states*) 2^+ en ^{90}Sr , producido en una reacción de transferencia de partícula alfa. Estados con simetría mezcla de protón-neutrón han sido descritos en el modelo de interacción de bosones (IBA-2) con grados de libertad de protón-neutrón. La estructura y las propiedades de dichos estados son determinados por correlaciones efectivas p-n en la banda de valencia de núcleos colectivos. Aunque se calcula que algunos de dichos estados tendrían que decaer mediante transiciones M1 intensas, ningún estado con simetría mezcla ha sido claramente identificado en núcleos inestables en base a intensas transiciones M1. Los datos están siendo analizados por un estudiante de doctorado en el grupo de física nuclear de Darmstadt. Con dicho grupo existe una estrecha colaboración en ese tipo de mediciones desde hace mucho tiempo.

MEDIDAS DE LA VIDA MEDIA EN ISÓTOPOS DE ESTAÑO

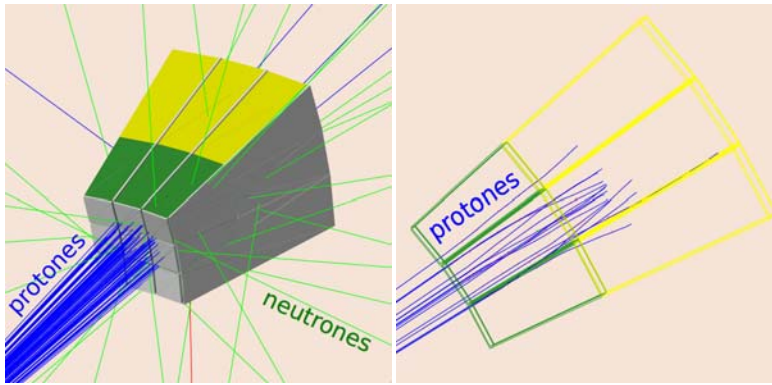
Las vidas media de los estados excitados son cruciales para la comprensión de la estructura de un determinado núcleo, ya que proporcionan información muy directa sobre la función de onda del estado y por lo tanto permiten rigurosas pruebas para los diferentes modelos teóricos. Si la vida media del estado de interés es muy corta, del orden de los ps o incluso menor, han de emplearse las técnicas basadas en el Efecto Doppler para medir su vida media. En 2010, se completó el análisis de la vida media de los datos obtenidos en dos experimentos, hechos en 2007 y 2009, en los cuales se estudió la excitación Coulombiana de varios haces estables de estaño, en el acelerador UNILAC (GSI, Alemania). Los resultados (publicados en Phys. Lett. B 695 (2011) 110) indican un mínimo en la probabilidad de transición B(E2) desde el estado fundamental al primer estado excitado 2^+ , en contra de lo esperado, tanto desde un punto de vista de los esquemas de “*seniority*”, como de los cálculos a gran escala del modelo de capas. Estos resultados requieren una mayor investigación teórica y experimental. Con el fin de proseguir con este interesante campo, se preparó una propuesta para estudiar algunos de estos isótopos estables de estaño de forma complementaria en TRIUMF que se aprobó en noviembre de 2010 y es muy probable que se realice en 2011 (portavoces: Kris Starosta de SFU Vancouver y A. Jungclauss).

ESTRUCTURA NUCLEAR DE ESTADO EXCITADOS DE GRAN MOMENTO ANGULAR EN ISÓTOPOS DE OSMIO E IRIDIO

En 2010, nuestro estudiante de doctorado Victor Modamio terminó el análisis de los datos obtenidos en el experimento realizado en el laboratorio LNL en Legnaro (Padua, Italia) mediante una reacción de fusión incompleta de interés para el estudio de la estructura de alto espín para algunos isótopos Os e Ir. En este trabajo se pudo identificar un nuevo isómero de alto espín en ^{187}Ir y además estudiar el acoplamiento vibracional de cuasipartícula en dicho núcleo. Estos resultados han sido publicados en el Phys. Rev. C 81 (2010) 054304 y en abril de 2010, Víctor Modamio defendió su tesis doctoral en la Universidad Complutense de Madrid.

I+D PARA EL EXPERIMENTO R3B EN LA FUTURA INSTALACION FAIR

Esta línea del trabajo se realiza dentro de la colaboración de R3B de FAIR, donde nuestro trabajo se concentra en desarrollos de I+D para el espectrómetro CALIFA de γ y de protones que rodeará el blanco en el experimento R3B. Nuestro trabajo se centra en dos partes bien diferenciadas: 1) Progresos para el *FrontEndCap* de CALIFA, donde se está investigando un nuevo concepto constituido por centelladores integrados por dos cristales (*Phoswich*). Un prototipo de uno de estos dispositivos se ha caracterizado en el laboratorio mediante fuentes radiactivas estándar y se ha llevado al CMAM para conocer su respuesta a gammas de alta energía y al laboratorio TSL en Uppsala para conocer la respuesta a protones de la alta energía (180 MeV). También, estamos haciendo simulaciones del comportamiento del detector de *Phoswich* integrado por 3cm LaBr₃ (Ce) 1+ 5cm LaCl₃ (Ce), como simulaciones para la construcción de un prototipo CEPA de 9 cristales *Phoswich* (ver figura). El primer objetivo era separar e identificar los pulsos de cada cristal individual del *Phoswich*, usando una sola lectura y se ha cumplido con éxito. 2) La segunda línea de I+D está relacionada con la lectura electrónica de la parte central de CALIFA. En ella los cristales de CsI se acoplan a diodos de avalancha de gran superficie (LAPD), que son muy sensibles al voltaje aplicado y a la temperatura ambiental. Hemos podido controlar y estabilizar el voltaje aplicado con una regulación automática en función de la temperatura ambiental. Los resultados indican que se logra mantener la resolución del detector durante un periodo largo.



Simulación de *Geant4* para protones de 150 MeV impactando en el Prototipo CEPA, un conjunto de 9 centelladores *Phoswich* cada uno construido por 4cm LaBr₃(Ce) + 6cm LaCl₃(Ce).

R3BROOT: DESARROLLO DE UN ENTORNO DE SIMULACIÓN

Se han perfeccionado algunas partes de la herramienta de simulación R3BRoot que actualmente está en desarrollo y que se empleará en la futura instalación de FAIR. Este programa utiliza *Geant4* como motor de simulación y ROOT como herramienta de análisis. La herramienta permite simular los distintos detectores que se encuentran en los montajes experimentales de experimentos de física nuclear en R3B (haces de reacciones radiactivos relativistas) en FAIR. Uno de ellos es el calorímetro de gammas CALIFA que está formado por dos partes, un barrilete llamado “*barrel*”, que cubre en ángulos polares entre 42° y 130° y un casquete llamado “*end-cap*” que se extiende en ángulos polares desde 4° hasta 42°. Este casquete delantero es la parte más compleja debido al Efecto Doppler que experimentan las partículas en estas reacciones de energías relativistas.

Para obtener un diseño óptimo de la parte delantera del calorímetro es necesario manejar y perfeccionar el código que se emplea en R3BRoot. Este programa incluye *Geant4* como motor de simulación y ROOT como herramienta de análisis. Así se han incorporado a dicho código varias geometrías de *end-cap* posibles y se han estudiado las interacciones de protones y gammas con dichas geometrías a las energías típicas del experimento R3B. Con el mismo programa se han analizado las eficiencias de fotopico y la distribución espacial y energética de los protones y gammas en esta región delantera del calorímetro. En estas simulaciones se han incluido procesos hadrónicos y las geometrías propuestas están adaptadas al caso real, es decir los cristales que las forman incluyen recubrimiento de teflón y una envoltura protectora de aluminio entre ellos.

DIAGNÓSTICO DE HAZ PARA HIE-ISOLDE

La doctora Francesca Zocca, financiada por el CPAN está trabajando en nuevos desarrollos para el diagnóstico de haz para el proyecto de mejora del acelerador de haces radioactivos REX-ISOLDE llamado HIE-ISOLDE ya que supone una mejora en energía, intensidad y calidad del haz. Dentro de este proyecto la Dra. Zocca se encarga de desarrollar un monitor de estado sólido para colocarlo en el haz tras los módulos superconductores (SC). Su objetivo es realizar medidas de energía y tiempo del haz a la vez que escanear la forma y tamaño del haz emergente de las cavidades superconductoras. Un prototipo de monitor de silicio ha sido testeado en la instalación existente, REX-ISOLDE, con resultados muy prometedores en términos de determinación del perfil longitudinal del haz y medidas a la salida de la cavidad.

COMPORTAMIENTO FÍSICO A NANO-ESCALAS

Probablemente el hidrógeno molecular (H₂) es el candidato actual más claro para sustituir a los combustibles fósiles como vector energético medioambientalmente neutro. El almacenamiento seguro y eficiente de H₂ presenta, sin embargo, una serie de desafíos tecnológicos aún no resueltos. Una de las posibles soluciones es la adsorción del H₂ a bajas temperaturas en materiales nano-estructurados suficientemente ligeros. Sin embargo, las limitaciones prácticas imponen una temperatura mínima de 77 K (la del aire líquido) y unas 50 atmósferas de presión máxima. Esto impone unas condiciones termodinámicas particularmente problemáticas. Por encima de los 33 K el hidrógeno molecular se encuentra en un estado supercrítico lo que implica un fluido que no puede ser condensado. Es decir, mediante interacciones débiles (comparables a las que se dan entre las propias moléculas) tales que no produzcan la ruptura de la molécula (fisisorción), el estado termodinámico es tal, que no se puede conseguir una retención substancial de las

moléculas sobre el substrato adsorbente. Como quiera que la retención mediante enlace químico (quimisorción) implicaría temperaturas demasiado altas en la práctica para volver a liberar el hidrógeno, es necesario pensar en mecanismos de atrapado microscópico más allá de los presentes en los adsorbentes habituales.

Mediante el uso concurrente de técnicas de dispersión de neutrones y medidas de adsorción hemos podido identificar algunos mecanismos que contribuyen a aumentar sustancialmente la capacidad de almacenamiento de los correspondientes adsorbatos. Más concretamente, hemos podido observar un proceso de atrapado cinético de las moléculas de H_2 en determinadas estructuras carbonosas de haces tubulares. En el proceso de llenado, la estructura se va expandiendo, lo que por un parte aumenta su capacidad nominal de almacenamiento según aumenta la presión, mientras que, por otro, las moléculas quedan en parte cinéticamente atrapadas en la estructura de tal forma que al volver a bajar la presión un exceso de ellas queda retenido en la estructura dando lugar un ciclo de histéresis en el proceso de adsorción/desorción.

ESTRUCTURA Y DINÁMICA MICROSCÓPICA DE MATERIA CONDENSADA DESORDENADA

La riqueza de estructuras microscópicas de la materia condensada va mucho más allá de las tradicionales fases cristalinas (sólido ordenado), vidrio (sólido desordenado) y líquido (fluido). Sustancias molecularmente sencillas como los alcoholes simples (metanol, etanol, propanol,...) presentan fases con diferentes tipos de ordenamiento espacio-temporal en diferentes grados de libertad. Probablemente el ejemplo más destacable es el etanol en el que a parte del cristal, vidrio y líquido convencionales puede adoptar una fase de vidrio orientacional con los grados de libertad traslacionales ordenados en un cristal bcc mientras que los orientacionales están en una fase vítrea desordenada. Estos grados orientacionales a su vez se “funden” a una determinada temperatura para empezar a rotar alrededor de los centros de masas moleculares ordenados cristalinamente. En este contexto, haciendo uso de técnicas de difracción de neutrones, hemos estudiado la cinética de la transición entre esta fase cristalina rotora (cristal plástico) y el cristal monoclinico estándar.

DESARROLLO DE INSTRUMENTACIÓN AVANZADA PARA FUENTES DE NEUTRONES

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

- Servir como un centro de diseño, desarrollo y prototipación de algunas estructuras de aceleración responsables de la ganancia en energía del haz hasta unos 2.5 GeV.
- Desarrollar, dentro de nuestro sistema de Ciencia-Tecnología-Innovación, un laboratorio especializado en Ciencia y Tecnología de Aceleradores de Potencia, comparable con los existentes en los países de nuestro entorno que asumen labores de desarrollo y coordinación de los esfuerzos que estos realizan en Grandes Instalaciones Internacionales.
- Dotar a nuestro entramado industrial de herramientas que le permitan posicionarse con ventaja en áreas que requieren el uso de haces de iones ligeros (semiconductores de potencia, industria aeroespacial, litografía, materiales ultra-duros).

A parte del centro de aceleradores, está en curso el montaje del instrumento WISH (segunda estación blanco de la instalación ISIS) en el que también se participa en varios de sus componentes así como el desarrollo de una actualización del instrumento de PEARL (primera estación “blanco” de la instalación ISIS) un instrumento especializado en estudios de muestras a presiones extremas.

2A.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR

LÍNEAS DE INVESTIGACIÓN:

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

SUBLÍNEAS DE INVESTIGACIÓN:

- Física Molecular de sistemas atmosféricos y astrofísicos.
- Cinética de plasmas fríos y estudios de interacciones plasma-superficie.
- Dinámica y cinética de reacciones químicas.
- Espectroscopía Raman en chorros supersónicos de gases.
- Agregación molecular en chorros de gases.
- Coeficientes de transferencia de energía rotacional en colisiones moleculares.
- Parámetros espectroscópicos de moléculas relevantes en procesos atmosféricos o de combustión.
- Control cuántico molecular.
- Alineamiento y orientación molecular.
- Gases cuánticos ultrafríos.

TÉCNICAS UTILIZADAS:

- o Espectroscopía de infrarrojo y espectrometría de masas aplicadas a sistemas de baja temperatura y presión.
- o Métodos Computacionales: Gaussian, SIESTA, MOLPRO.
- o Generación de plasmas fríos en descargas de gases a baja presión.
- o Espectrometría de masas de iones y neutros con resolución de energía.
- o Espectroscopía visible de emisión de plasmas.
- o Sondas de Langmuir para medidas de energía electrónica y de densidad de carga.
- o Espectroscopía Raman lineal.
- o Chorros supersónicos de gases.
- o Microchorros de líquidos subenfriados.
- o Criogenia.
- o Espectroscopía Raman Estimulada.
- o Doble resonancia Raman-Raman.
- o Métodos teóricos y computacionales.

LABOR INVESTIGADORA:

FÍSICA MOLECULAR DE ATMÓSFERAS Y PLASMAS

Esta línea de investigación se subdivide en tres apartados que se indican a continuación.

Física molecular de sistemas atmosféricos y astrofísicos

Alrededor de 2006 empezamos una nueva línea dedicada al estudio de sistemas sólidos que pudieran servir de modelo de objetos astrofísicos. Desde esa fecha hemos trabajado sobre mezclas de hielos de agua, dióxido de carbono, metano y metanol, que son algunos de los más abundantes constituyentes de los núcleos de los cometas. Hemos estudiado estos sistemas por medio de espectroscopía de infrarrojo y espectrometría de masas. Mediante una cámara de alto vacío y un criostato en ciclo cerrado de helio somos capaces de alcanzar hasta unos 6 K, lo que nos permite acceder a un rango de temperaturas muy interesantes en el ámbito astrofísico. En los párrafos siguientes describimos en mayor detalle las contribuciones más relevantes obtenidas durante el año 2010.

Hemos completado una serie de investigaciones sobre hielos de metano y agua, estimulados por observaciones recientes de CH₄ en distintos objetos astrofísicos. Preparamos muestras co-depositadas de metano y agua en un amplio rango de estequiometrías, y estudiamos su comportamiento cuando se calientan hasta 60 K. El análisis espectroscópico se centró en las bandas del metano, y también en las de los enlaces “colgantes” (*dangling bonds*, en inglés) que aparecen en espectros de mezclas. La banda prohibida ν_1 aparece en el espectro (3.44 μm), indicando una cierta forma de metano distorsionado, probablemente adsorbido en microporos de agua o atrapado dentro de la estructura del hielo amorfo. Al elevar la temperatura del hielo a 60 K se libera parte del metano, pero una fracción queda retenida con un valor máximo del 7 ± 2 %. Este límite proporciona información sobre las propiedades térmicas de objetos astrofísicos. Las distintas características espectrales de los enlaces *dangling* en mezclas pueden asimismo transmitir información acerca de la estequiometría de la mezcla.

Hemos continuado nuestras investigaciones sobre el sistema de hielo formado por amonio y agua, intentando aclarar la asignación de la banda de 6.85 μm observada en el espectro de objetos estelares jóvenes (YSO), que a veces se ha atribuido al modo de flexión del NH₄⁺. Hemos estudiado soluciones congeladas de NH₄Cl, NH₄COOH y NaCOOH en agua, en un rango de concentraciones y temperaturas astrofísicas, por medio de la técnica conocida como *hyperquenching*, es decir, deposición de gotas líquidas sobre un sustrato frío, y también por deposición directa de los

vapores. El espectro de estas especies varía sustancialmente con la temperatura, y, en algunos casos, con la técnica de deposición. Las implicaciones astrofísicas de estos resultados se discuten en un artículo publicado en *The Astrophysical Journal*.

Dentro de la línea de investigación atmosférica, hemos completado un estudio teórico sobre mezclas ternarias de ácido clorhídrico, ácido nítrico y agua, calculando la predicción teórica de los espectros de infrarrojo y microondas de un conjunto de 15 agregados que estos compuestos parecen ser capaces de formar. La presencia de estas especies en la atmósfera podría detectarse por comparación con las predicciones de este trabajo. Por otra parte, continuamos la puesta a punto de una nueva cámara de flujo dedicada a la producción y estudio de aerosoles atmosféricos. La cámara está prácticamente lista y esperamos obtener los primeros resultados en 2011.

Igualmente hemos realizado un estudio teórico sobre el mecanismo de catálisis de liberación de especies yodadas en la atmósfera. En esta línea de investigación hemos explorado reacciones de yodado de compuestos orgánicos simples que pueden encontrarse en la troposfera marina.

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

Cinética de plasmas fríos y estudios de interacciones plasmas-superficies

Durante 2010, se han realizado varios estudios en plasmas fríos, tanto desde un punto de vista fundamental, como tecnológico. Los estudios básicos se han dirigido a la cinética de plasmas de gases a baja presión. La investigación aplicada se ha hecho en colaboración con el Grupo de Interacción Plasma-Pared de equipo de fusión del CIEMAT y con el Instituto de Sistemas Optoelectrónicos y Microtecnología (ISOM) de la Universidad Politécnica de Madrid.

En la primera línea, hemos iniciado un estudio de plasmas de H_2+D_2 a diferentes presiones y composiciones relativas, que nos permitirá aclarar la relevancia de los procesos en superficie y las reacciones en fase gas para iones y neutros. Actualmente se está efectuando el análisis de los datos, comparando los resultados experimentales con un modelo teórico desarrollado por nosotros. Estos sistemas son de gran interés en dispositivos de fusión y en química interestelar, así como en procesos tecnológicos en los que interviene la deposición de películas que contienen hidrógeno. Además, se han finalizado los estudios de plasmas fríos H_2+Ar , en los que hemos encontrado un acuerdo satisfactorio entre los datos experimentales y las predicciones teóricas. Los resultados más importantes han sido: a) la existencia de pequeñas fracciones de electrones de alta energía (>50 eV) que acompañan a los electrones térmicos ($\sim 3-4$ eV) comúnmente existentes en estos plasmas. Esto justifica la aparición de concentraciones de Ar^{++} inesperadamente altas. b) La atenuación de los iones de Ar^+ en la vaina del plasma mediante procesos de intercambio asimétrico de carga con H_2 , produciendo ArH^+ . Los plasmas de H_2+Ar son de amplio uso en diversos campos de ciencia de materiales, donde se utilizan para deposición y arranque de material, o como fuentes de partículas; por tanto, los efectos estudiados por nosotros pueden contribuir a optimizar las condiciones de procesado.

En colaboración con el CIEMAT, hemos continuado investigando la eliminación de películas duras de carbono amorfo hidrogenado (a-C:H) de ranuras que simulan las estructuras “en cepillo” presentes en los dispositivos de fusión, de interés para ITER. Con tal propósito, hemos depositado películas de carbono mediante descargas de $He + CH_4$, y posteriormente hemos eliminado las películas por oxidación, calentándolas hasta $300^\circ C$ en un horno de con NO_2+N_2 a presión controlada.

En colaboración con el ISOM, hemos terminado nuestro estudio sobre el crecimiento de películas delgadas de nitruro de silicio (SiN) sobre transistores de alta movilidad electrónica (HEMT), realizado por deposición química asistida por plasma. Esto nos ha permitido proponer la mejora de condiciones para este proceso tecnológico. Por otro lado, se ha determinado el espesor y la composición de las muestras realizadas en nuestros estudios con el CIEMAT mediante perfilometría y espectroscopía de dispersión de rayos X (EDX), con el equipamiento disponible en el ISOM.

Dinámica y cinética de reacciones químicas. Procesos inducidos por láser

Se ha abordado un estudio comparativo de diversos tratamientos teóricos para la dinámica de las reacciones de intercambio de protón (o deuterón) $D^+ + H_2$ y $H^+ + D_2$, variantes isotópicas de $H^+ + H_2$, que constituye el modelo más simple en el campo de las reacciones ión-molécula. Este trabajo, motivado por nuestros resultados previos obtenidos con el formalismo de probabilidades acumulativas de reacción, ha demostrado que a pesar de la aparente sencillez del problema, con solo tres protones y dos electrones, existen apreciables discrepancias entre los resultados de los tratamientos, cuántico, clásico y estadístico. Ninguno de ellos parece dar cuenta de modo satisfactorio de la reactividad del sistema en el intervalo de energía (hasta ~ 1.8 eV) en el que el intercambio protónico es el único canal reactivo. En la actualidad continuamos analizando las fortalezas y debilidades de los distintos métodos y las razones de las discrepancias. Esta investigación se ha llevado a cabo dentro del marco de nuestra “Unidad Asociada de Química Física molecular”, que incluye a grupos de la Universidad Complutense y del Instituto de Química Física Rocasolano. En el contexto de esta colaboración se han estudiado también procesos inducidos por láser. En particular se ha investigado el

canal radic lico en la fotodisociaci n del acetaldeh do para longitudes de onda entre 315 y 325 nm, utilizando la t cnica de proyecci n del mapa de velocidades (velocity map imaging). Los resultados han puesto de manifiesto la competencia entre distintos canales de disociaci n en las cercan as de la barrera energ tica para el canal de salida triplete. Tambi n se ha investigado la fotodisociaci n de CH₃I y de pirrol. En otro trabajo se ha demostrado experimentalmente la generaci n de arm nicos de la radiaci n fundamental (1064 nm) de un l ser de Nd:YAG a partir del CaF presente en plumas de ablaci n de CaF₂.

Pueden encontrarse m s detalles acerca de esta l nea de investigaci n y los investigadores y personal de apoyo que participan en ella en nuestra p gina web: <http://www.iem.cfmac.csic.es/departamentos/fismol/fmap/main.htm>.

FLUIDODIN MICA MOLECULAR

El objetivo central de esta l nea de investigaci n es el estudio de los flujos de fluidos en la interfase entre la descripci n microsc pica, esencialmente molecular y cu ntica, y la macrosc pica, regida por la mec nica de fluidos en el r gimen del continuo. Si bien ambas vertientes est n bien desarrolladas como campos independientes, su conexi n es una tierra de nadie con acusado d ficit de datos experimentales, de modelos te ricos suficientemente rigurosos, y de m todos de c culo eficientes.

Desde el punto de vista experimental, como ha demostrado el Laboratorio de Fluidodin mica Molecular, los chorros supers nicos de gases son un medio extraordinariamente f rtil, en el que es viable el estudio del mecanismo fundamental de la transferencia de energ a, las colisiones moleculares inel sticas, cuya formulaci n aparece en el n cleo de la ecuaci n integro-diferencial de Boltzmann generalizada. Por su parte, durante 2010 hemos iniciado el estudio de los chorros de l quidos subenfriados, que han resultado ser un medio ideal para estudiar la solidificaci n homog nea, libre de los efectos de las paredes de recipientes y de impurezas.

El Laboratorio de Fluidodin mica Molecular ha desarrollado a lo largo de los  ltimos dieciseis a os dos instalaciones de diagn stico de chorros  nicas en su g nero por sus prestaciones y flexibilidad. Una (A) esta dedicada al estudio de colisiones cohesivas y chorros de l quidos, y la otra (B), a colisiones inel sticas. Sobre estas instalaciones se han realizado a lo largo de 2010 importantes modificaciones para adaptarlas a los experimentos que se han ido realizando. En este sentido, se ha montado en la instalaci n (A) un nuevo sistema de micro toberas capilares de vidrio enfriadas mediante un criostato de He l quido, dise ado conjuntamente con la Universidad de Frankfurt, para la producci n y estudio espectrosc pico de microfilamentos de l quidos subenfriados. Por su parte, en la instalaci n (B) ha habido que implementar varias modificaciones para poder producir chorros gaseosos de agua, as  como sus mezclas con H₂ y He, colisiones que son objeto de los proyectos de investigaci n en curso. Para ello se ha instalado un nuevo portatoberas solidario a un vaso calefactado, as  como una trampa criog nica en el sistema de evacuaci n de gases previo a las bombas de vac o.

En la instalaci n (A) se han generado, en colaboraci n con la Universidad de Frankfurt, microchorros (filamentos) l quidos de para-H₂, normal-H₂, O₂, y N₂. En vac o, estos filamentos, de 5 micras de di metro, se enfran por evaporaci n superficial, obteni ndose l quido altamente subenfriado por debajo del punto de fusi n, hasta que se rompen en microgotas o solidifican. Sobre esos filamentos, monitorizados mediante im genes de sombra por iluminaci n l ser, se han realizado series de espectros Raman a distintas distancias axiales y transversales. En los filamentos de para-H₂ se ha observado, con una resoluci n temporal de ~10 ns, la cristalizaci n a una mezcla de las fases c bica y hexagonal, lo que ha permitido medir por primera vez la velocidad de cristalizaci n de ~30 cm/s. Los filamentos de O₂ solidifican al cabo de mucho m s tiempo, mientras que los de N₂ se rompen en gotas en las condiciones de nuestros experimentos. La t cnica desarrollada ha demostrado ser una herramienta muy potente para estudiar los cambios de fase tan r pidos como los estudiados.

En la instalaci n (B) se han realizado medidas de series de chorros supers nicos de ox geno puro desde toberas de 90 y 280 micras con temperaturas de estancamiento T₀=298 K y presiones p₀=100 mbar, 230 mbar, y 10 bar, con el fin de estudiar las colisiones inel sticas O₂:O₂ en el rango de temperaturas por debajo de 50 K. Tambi n se han medido series de chorros gaseosos de agua pura con temperaturas de estancamiento desde T₀=320 hasta 400 K y presiones desde p₀=100 mbar hasta 1 bar, as  como mezclas de con He, para-H₂ y normal-H₂. Del an lisis de estas medidas ha resultado evidente que hay que mejorar la precisi n en la determinaci n de las presiones parciales para poder extraer informaci n cuantitativa sobre las colisiones inel sticas en estos sistemas.

En el apartado de interpretaci n de datos se ha completado el primer an lisis pormenorizado de los chorros supers nicos de O₂ puro, de cara a validar experimentalmente los c culos de las secciones eficaces y los coeficientes cin ticos nivel-a-nivel en las colisiones inel sticas del sistema O₂:O₂, obtenidos v a ab-initio por el grupo te rico de Din mica e Interacciones del Instituto de F sica Fundamental del CSIC. Los valores calculados ab-initio han resultado estar en buen acuerdo con los experimentos en el intervalo de temperaturas de 10 a 34 K. Se espera extender esta colaboraci n entre los grupos te rico y experimental a otros sistemas de inter s astrof sico, como CO y H₂O, lo que mejorar  la

comprensión de los procesos colisionales inelásticos en el régimen de muy bajas temperaturas, y permitirá la validación experimental de los potenciales intermoleculares empleados en los cálculos.

Por último, en el capítulo metodológico cabe mencionar el desarrollo de un procedimiento robusto para verificar los coeficientes cinéticos nivel-a-nivel para colisiones inelásticas y estimar su intervalo de confianza, mediante un tratamiento estadístico por simulación Monte Carlo, así como la elaboración del correspondiente programa FORTRAN.

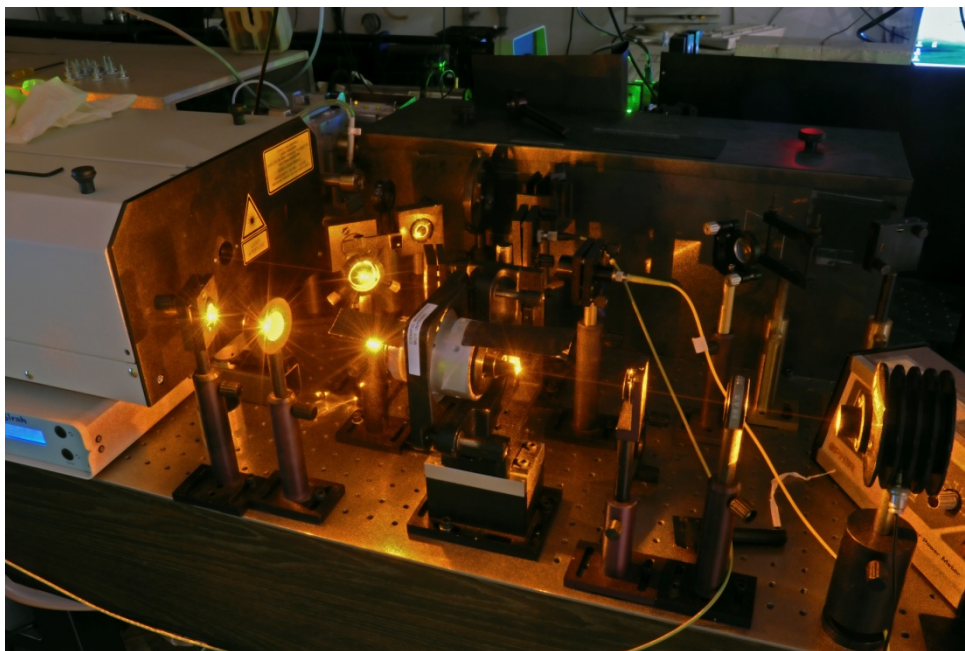
ESPECTROSCOPIA LÁSER

Como resultado del esfuerzo de tres años, hemos concluido el desarrollo de la técnica de doble resonancia Raman-Raman para el estudio con resolución temporal de la transferencia de energía rotacional (RET) por colisiones con resolución estado a estado. Los estudios de RET son de gran relevancia en numerosas disciplinas: balance energético en atmósferas planetarias, diagnóstico en medios de combustión, dinámica de láseres, situaciones de no-equilibrio termodinámico local, etc., así como en el origen de la formación de los perfiles espectrales en fase gas.

Los primeros resultados, la matriz de constantes de velocidad para el sistema $C_2H_2-C_2H_2$, han sido publicados en el Journal of Chemical Physics. Cabe destacar que en este trabajo, gracias al enfoque experimental y el proceso de análisis de datos, se ha obtenido la matriz para todos los niveles impares hasta $J=17$ sin recurrir a ninguna ley de escala o ajuste, como es frecuentemente el caso en este tipo de estudios. Un objetivo más amplio de esta línea de investigación es llenar el hueco entre la dinámica de las colisiones rotacionalmente inelásticas y los estudios de efectos colisionales en los perfiles espectrales en fase gas (fundamentalmente ensanchamiento por presión y *line mixing*). Tanto las colisiones rotacionalmente inelásticas como las elásticas reorientacionales son los mayores contribuyentes al ensanchamiento por presión. La espectroscopia Raman de alta resolución proporciona abundante información en este tipo de estudios: como la traza del tensor de polarizabilidad no es sensible a las colisiones elásticas que sólo producen reorientación, éstas no contribuyen al ensanchamiento de las líneas de transiciones Raman completamente polarizadas, lo que permite un vínculo mucho más directo entre las medidas de ensanchamiento por presión y los modelos de colisiones. Incluso con esta importante simplificación, normalmente es necesario hacer alguna aproximación más: la relajación vibracional y desfase vibracionales no contribuyen apreciablemente al ensanchamiento, y las tasas estado a estado no dependen del estado vibracional. Con la extensión de nuestra técnica de Espectroscopia Raman estimulada de alta resolución al dominio temporal con el desarrollo de este sistema de bombeo-prueba con resolución temporal, ahora tenemos las herramientas para enlazar el dominio espectral (ensanchamiento por presión y *line mixing*) con el temporal (evolución de poblaciones fuera de equilibrio). En este sentido hemos medido los coeficientes de ensanchamiento por autocolisiones de C_2H_2 (0100) a 165 K y a temperatura ambiente. El análisis de estos resultados, junto con los del estudio de RET mencionado más arriba está siendo realizado en colaboración con miembros del IFF(CSIC) (M. Bartolomei, M. Hernández y J. Campos).

También se ha registrado el espectro de alta resolución de la banda ν_5 del etileno (C_2H_4). El etileno es un contaminante troposférico generado por el tráfico rodado y la quema de biomasa, y se ha detectado en las atmósferas de Júpiter, Saturno, Neptuno y Titán. Los resultados están siendo analizados en colaboración con nuestros colegas del Instituto Carnot de Borgoña (M. Rotger y V. Boudon).

El espectrómetro de diferencia de frecuencias ha sido mejorado. Recientemente se trasladó a un laboratorio independiente del de espectroscopia Raman, y hemos aprovechado la oportunidad para actualizar algunos subsistemas importantes: la estabilización en frecuencias del láser de Ar^+ , parte del camino óptico, y los sistemas de adquisición de datos y de medida de la escala de frecuencia del espectro infrarrojo.



Laboratorio de espectroscopía Raman estimulada. Estabilización en frecuencia de uno de los láseres sintonizables.

FÍSICA MOLECULAR TEÓRICA

Control Cuántico Molecular. Alineamiento y orientación molecular

Se ha continuado el estudio del control del alineamiento y la orientación de un sistema de moléculas diatómicas dipolares atrapadas en una red óptica y sometidas a una combinación de campo eléctrico estático y un tren de pulsos láser intensos no resonantes. La interacción dipolar de largo alcance introduce propiedades macroscópicas radicalmente nuevas en un gas cuántico y el campo está en plena expansión a nivel teórico y experimental. El control de la orientación de los dipolos permite modificar estas propiedades. El estudio de este complejo sistema es un desarrollo importante que mezcla nuestros estudios previos sobre control de estados cíclicos en moléculas aisladas con la línea de gases cuánticos ultrafríos iniciada el año pasado. Nuestro objetivo es adaptar los métodos de control de orientación en moléculas aisladas a este nuevo campo. Se han obtenido resultados preliminares favorables en un sistema simplificado con moléculas dipolares ancladas a sitios de la red.

En moléculas aisladas, se ha continuado el estudio de estados cíclicos de energía para los cuales la orientación molecular oscila de forma sincrónica entre valores máximos y mínimos casi óptimos a múltiplos enteros de la frecuencia de repetición del tren de pulsos. Se ha investigado la creación de estos estados a partir de moléculas en ausencia de campo explotando los cruces adiabáticos entre las cuasi-energías del hamiltoniano de Floquet.

Por otra parte, hemos estudiado la transferencia de energía en *light-harvesting complexes* (LHC) relacionados con la fotosíntesis y la importancia de la coherencia cuántica y aspectos no markovianos en la disipación de energía. Se ha utilizado un modelo excitónico y se ha calculado el rendimiento de la transferencia de energía así como su dinámica temporal para el complejo Fenna-Matthews-Olson, teniendo en cuenta tanto las altas energías de reorganización como el importante acoplamiento entre los grados de libertad excitónicos y el entorno molecular típicamente presentes en LHC. Este trabajo se ha realizado en colaboración con el grupo del Dr. T. Kramer en la Universidad de Regensburg.

Gases Cuánticos Ultrafríos

Hemos estudiado la posibilidad de generar momento en un sistema de átomos inicialmente en reposo y atrapados en una red óptica, modulando la red mediante un potencial periódico en el espacio y en el tiempo y de promedio cero. La creación de estos “*ratchets*” cuánticos en ausencia de disipación y su relación con las simetrías espacio-temporales del sistema reviste gran interés y es un tema de discusión muy activo. La generación de una corriente asintótica a tiempo infinito requiere la ruptura simultánea de la simetría espacial y temporal. Nuestro trabajo ha demostrado que, incluso en presencia de simetría de inversión temporal, se puede conseguir una corriente promedio neta, en una escala temporal controlable comparable a la duración de un experimento real.

Se ha estudiado la posibilidad de utilizar técnicas de conteo de átomos para distinguir fases fuertemente correlacionadas en átomos ultrafríos. Hemos extendido la teoría de conteo de fotones para calcular las distribuciones de número de átomos bosónicos y fermiónicos. En un gas de fermiones fuertemente correlacionado análogo al modelo de spin XY existe una transición de fase a temperatura cero. Hemos demostrado que los cumulantes de la distribución de número de átomos reflejan la transición de fase cuántica. Hemos analizado la dependencia con temperatura y encontrado que este efecto es visible a bajas temperaturas. Para el caso de bosones, hemos demostrado que las distribuciones de número de átomos sirven para distinguir estados superfluidos de aislantes así como estados tipo checkerboard y estados supersólidos. Este trabajo se ha realizado en colaboración con el grupo del Prof. M. Lewenstein del Instituto de Ciencias Fotónicas.

2A.4 DPTO. DE ESPECTROSCOPIA VIBRACIONAL Y PROCESOS MULTIFOTÓNICOS

LÍNEAS DE INVESTIGACIÓN:

- Físico-Química de los Procesos de Deposición y Ablación
- Bioespectroscopía
- Espectroscopía sobre superficies
- Fotónica de plasmones superficiales y Metamateriales

SUBLÍNEAS DE INVESTIGACIÓN:

- Ablación inducida por Radiación Láser Infrarroja
- Espectroscopía de Ruptura Dieléctrica en Plasmas inducidos por Láser (LIBS)
- Espectroscopía vibracional intensificada por superficies (SERS, SEF y SEIRA) sobre nanoestructuras metálicas
- Espectroscopía vibracional aplicada al estudio del Patrimonio Histórico-Artístico
- Espectroscopías SERS, SEF y SEIRA aplicadas a la detección de contaminantes y sustancias empleadas en dopaje deportivo
- Aplicaciones biológicas del SERS: estudio de la interacción fármaco/biomolécula
- Resonancias plasmónicas en nanoestructuras metálicas (nanoantenas): Raman y Fluorescencia
- Metamateriales en el dominio óptico

TÉCNICAS UTILIZADAS:

- Espectroscopía infrarroja (Normal, FTIR y SEIR)
- Espectroscopía Raman (Normal, micro-Raman, Raman mapping, Raman imaging y SERS)
- Espectroscopía infrarroja y Raman de correlación bidimensional mediante intercambio isotópico H/D.
- Espectroscopía Óptica de Emisión (OES).
- Fluorescencia Inducida por Láser (LIF).
- Espectroscopía Visible-UV
- Espectroscopía de Fluorescencia
- Microscopía electrónica de transmisión (TEM) y de barrido (SEM)
- Análisis estadístico multivariante
- Física Teórica (Electrodinámica Clásica) y Cálculos Numéricos

LABOR INVESTIGADORA:

ESPECTROSCOPIA DE PLASMAS INDUCIDOS POR LÁSER

Hemos estudiado los plasmas formados mediante Ruptura Dieléctrica inducida por láser de CO₂ (LIB) en diferentes atmósferas gaseosas utilizando Espectroscopía Óptica de Emisión (OES) de alta resolución. Hemos realizado el estudio espectroscópico del plasma formado en aire a temperatura ambiente y a presiones entre 32 y 101 kPa para estudiar los procesos involucrados en la formación del plasma mediante LIB. Las emisiones más intensas son debidas principalmente a relajaciones de N, O y fragmentos iónicos N⁺ excitados electrónicamente. Las emisiones menos intensas provienen de las especies excitadas O⁺, N₂⁺, O₂⁺, C, C⁺, C₂⁺, H, Ar y sistemas de bandas moleculares: N₂⁺(B²Σ⁺u-X²Σ⁺g⁺), N₂(C³Π_u-B³Π_g), N₂⁺(D²Π_g-A²Π_u) and OH(A²Σ⁺-X²Π).

Se han encontrado temperaturas de excitación en el rango 23400 – 26600 K para las especies iónicas N⁺ and O⁺. Se han medido los umbrales para la ruptura dieléctrica a diversas presiones. Nosotros proponemos que el impacto electrónico es el principal mecanismo responsable para la ruptura dieléctrica en aire.

Las características de las emisiones ópticas de diversas especies han sido estudiadas en función de la presión y de la irradiancia del pulso láser. Así mismo, hemos estudiado con resolución temporal la emisión óptica para diversas especies. Las distribuciones de velocidad y de energía cinética se obtuvieron a partir de medidas de tiempo de vuelo. La evolución temporal de la densidad electrónica en el plasma se utilizó para estimar la constante de recombinación a tres cuerpos.

Se ha investigado por primera vez el LIB del germane (GeH₄). Las emisiones observadas en el plasma de germane (2 – 10 kPa) son debidas principalmente a relajaciones de Ge, H, H₂ y fragmentos iónicos Ge⁺, Ge₂⁺ y Ge₃⁺ excitados electrónicamente. Se estimaron las temperaturas de excitación para el Ge (8100K) y Ge⁺ (23500K) y de la densidad electrónica ($(0.7-6.2) \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$) del plasma a partir del ensanchamiento Stark de diferentes líneas del Ge atómico. Estos parámetros se calcularon a diversas presiones de germane y a diferentes irradiancias. Se ha determinado el umbral de ruptura dieléctrica. Aunque los electrones necesarios para iniciar el proceso se producen a través de ionización multifotónica, la ionización por impacto electrónico es la principal vía para la ruptura dieléctrica en GeH₄.

PLASMAS DE ABLACIÓN INDUCIDOS POR RADIACIÓN LÁSER INFRARROJA

Hemos estudiado la ablación de láminas de Co y Ni. Cuando esta ablación se realiza en atmósfera de benceno (5-10 Torr) genera la ruptura dieléctrica de dicho gas, inhibiendo el plasma de ablación y produciendo depósitos nanoestructurados de carbón junto átomos de H, carbono iónico y neutro, C₂ y eteno y butadieno. Mediante análisis con espectroscopias FTIR, Auger y Raman y TEM se puso en evidencia que las características de los depósitos de carbono en sustratos de vidrio o en la propia superficie de la lámina, eran distintas. Las láminas de carbono depositadas en las superficies de las láminas irradiadas de Co o Ni presentan estructuras de grafito ordenado y fullerenos y tienen más proporción de fase ordenada sp² que las láminas depositadas en los sustratos de vidrio. Estos resultados sugieren un nuevo enfoque para la carbonización en fase gaseosa de moléculas orgánicas.

Estos trabajos se han realizado en colaboración con los Prof. J.J. Camacho y J.M. Poyato del Departamento de Físico-química de la Universidad Autónoma de Madrid y con el Dr. J. Pola del del Instituto de Procesos Físico-Químicos Fundamentales de Praga (República Checa).

BIOESPECTROSCOPIA INFRARROJA Y RAMAN

Dentro de esta línea de investigación se han medido espectros infrarrojos de fracciones sanguíneas de un grupo de 89 sujetos, siendo 65 de ellos pacientes de la enfermedad de Alzheimer y 24 controles sanos. En conjunto se han medido espectros de sangre periférica total, tres tipos de plasma (con diferente contenido en plaquetas), eritrocitos, linfocitos, suero y células blancas. Se están realizando tratamientos matemáticos de normalización, corrección de líneas de base espectrales y subsiguientes análisis por métodos estadísticos multivariantes (análisis de componentes principales, PLS y análisis de racimos), con el fin de clasificar espectros de muestras de pacientes y controles. Por otra parte, una de las características moleculares de esta enfermedad es el depósito de péptidos amiloideos en tejido cerebral adoptando una estructura conformacional en lámina beta. Por tanto hemos estudiado si este depósito en cerebro comporta un aumento de la concentración amiloidea en sangre, particularmente en fracciones linfocíticas. En todos los casos estudiados hasta ahora hemos obtenido una sensibilidad y especificidad del 85% y 91%, respectivamente, en la determinación cuantitativa espectral de estructura β-poli-peptídica como criterio de biodiagnóstico de esta enfermedad.

ESTRUCTURA DE SISTEMAS BIOLÓGICOS EN ALIMENTOS

En colaboración con el Instituto de Ciencia y Tecnología de Alimentos y Nutrición (ICTAN, CSIC) se han medido espectros infrarrojos y Raman de lípidos extraídos de músculo de merluza en estado fresco y almacenado en estado congelado. Los cambios espectrales que ocurren durante almacenamiento en congelación son indicativos fundamentalmente de fenómenos de hidrólisis. El análisis infrarrojo revela asimismo que las correspondientes lipasas actúan preferentemente a través de los dos grupos éster fosfolipídicos. Estos cambios espectrales se utilizarán de base para posterior análisis estadístico multivariante encaminado a la determinación de calidad alimentaria.

PREPARACIÓN DE NANOPARTÍCULAS METÁLICAS

La preparación de nanopartículas (NPs) metálicas con propiedades plasmónicas ha sido una línea prioritaria en este periodo. Se ha dedicado especial atención a las NPs con morfologías que dan lugar a intensificaciones altas del campo electromagnético como las nanovarillas y los nanoprismas triangulares. Para ello se han establecido las condiciones experimentales que dan lugar a a este tipo de morfologías.

Dentro de esta línea se ha procedido a la fabricación de sistemas metálicos mixtos core/shell en donde se combinan las propiedades plasmónicas de ambos metales, preservándose en la superficie las características del metal de la capa más externa. Concretamente se han fabricado con éxito sistemas Au/Ag y Au/Pt por reducción de Ag y Pt sobre

nanopartículas de Au, respectivamente. Estos sistemas se han caracterizado mediante resonancia de plasmones y microscopía (TEM, SEM y AFM), y SERS. El empleo de sistemas moleculares marcadores o sonda, que se adsorben de manera distinta sobre los distintos metales de la capa más externa, ha permitido obtener una valiosa información acerca de la distribución de los metales en las partículas resultantes, así como determinar su efectividad en SERS.

Dentro de esta línea también, se ha llevado a cabo la fabricación de sistemas core/shell consistentes en nanopartículas magnéticas recubiertas de Ag y Au, dando lugar a sistemas donde las propiedades plasmónicas de los metales empleados para la cubierta (shell) se combinan con las magnéticas del núcleo de magnetita (core). Estos sistemas han sido caracterizados mediante técnicas como espectroscopía de absorción UV-visible, IR y Raman, microscopía TEM, difracción de Rayos X y medidas de magnetización.

Finalmente se ha continuado con el ensamblaje de NPs de metales plasmónicoa mediante el uso de moléculas bifuncionales que dan lugar a la formación de cavidades interpartícula altamente eficaces en la intensificación de la dispersión Raman. Lo que en inglés se conoce como *hot spots*. Para llevar a cabo esta tarea se han empleado como moléculas bifuncionales diaminas, ditióles y dicarboxilates alifáticos.

FUNCIONALIZACIÓN DE SUPERFICIES METÁLICAS: FABRICACIÓN DE NANOSENSORES

Como en años precedentes, una parte importante del trabajo realizado en nuestro grupo durante 2010 se ha dedicado a la funcionalización de las superficies metálicas obtenidas mediante autoensamblaje de moléculas orgánicas. La funcionalización permite aumentar de manera considerable la sensibilidad y la selectividad de las nanoestructuras formadas, conduciendo así a la obtención de 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.

La funcionalización con moléculas hospedadoras o receptoras tales como calixarenos y ciclodextrinas ha sido posible gracias a la inclusión en éstas de grupos de alta afinidad por las superficies metálicas, tales como el grupo ditiocarbamato (DTC). El DTC presenta una alta afinidad por Au y Ag, lo que ha permitido aumentar la eficacia en la funcionalización, dando lugar a sistemas metal/ensamblador con altas prestaciones en la detección de contaminantes, fármacos y dopantes empleados ilícitamente en el deporte. La detección de estos analitos es posible gracias a la existencia de cavidades hidrofóbicas en estos hospedadores, en los que se pueden alojar las moléculas que se pretende detectar.

Otro grupo de moléculas empleadas anteriormente en la funcionalización de superficies metálicas, los viológenos, cuya actividad hospedadora está relacionada con sus propiedades como aceptor de electrones, se han empleado en la detección de contaminantes tipo hidrocarburos policíclicos aromáticos, que actúan como donadores de electrones. Los viológenos interaccionan fuertemente con el metal a través de la formación de pares iónicos o complejos de transferencia de carga entre el viológeno y el haluro previamente unido al metal. Los viológenos bifuncionales mejoran extraordinariamente las prestaciones de estas sustancias por actuar como creadores de espacios interpartícula con alta intensificación de campo electromagnético (*hot spots*).

Finalmente se ha estudiado la funcionalización mediante el uso de moléculas bifuncionales diaminas, ditióles y dicarboxilates alifáticos, capaces de inducir la formación de *hot spots*, merced a la creación de uniones NP-NP. La identificación de la banda de resonancia plasmónica de los dímeros formados ha permitido encontrar una correlación entre la longitud de la cadena alifática. La distancia interpartícula y la longitud de onda del máximo de absorción del plasmón longitudinal del dímero NP-NP. Estos ensambladores moleculares han permitido la detección de contaminantes con estructura no aromática que no podían ser analizados con calixarenos y viológenos.

INTERACCIÓN ENTRE NANOPARTÍCULA METÁLICA Y BIOMOLÉCULA

Dentro también del ámbito de la funcionalización de superficies metálicas nanoestructuradas, se ha continuado con la línea de investigación consistente en el diseño de sistemas mixtos metal-biomolécula para la fabricación de sistemas con altas prestaciones nanotecnológicas. En particular, la adsorción de oligopéptidos con NP metálicas da lugar a nanobiomateriales que pueden funcionar como bio-chips o biosensores. Durante este año se ha llevado a cabo un estudio de la adsorción de péptidos de secuencia determinadas y con características de polaridad e hidrofobicidad diferentes con el fin de evaluar las afinidades con las superficies metálicas. Con el fin de aumentar la afinidad de péptidos y proteínas por las superficies metálicas empleadas en SERS, se ha procedido a la funcionalización de éstas mediante compuestos polisacáridos de alta afinidad por los metales, como quitosano y alginato. Este método ha permitido aumentar la biocompatibilidad de las NPs metálicas normalmente empleadas en SERS, dando lugar a un aumento de la afinidad de biomoléculas por el metal. Así, por ejemplo, mediante este método se ha desarrollado un estudio de la interacción de colágeno con superficies metálicas que ha dado ya resultados positivos.

Otro tipo de biomoléculas cuya adsorción sobre NPs metálicas se ha estudiado durante este año han sido sustancias húmicas y melaninas resultado de procesos de digestión inducidos por hongos. En esta línea se ha llevado a cabo un estudio de la adsorción de sustancias húmicas de distinto origen (suelo, leonardita, lignito) sobre electrodos metálicos, con el fin de estudiar el efecto del potencial aplicado sobre los espectros SERS y SEF de estas sustancias.

FLUORESCENCIA INTENSIFICADA POR SUPERFICIES METÁLICAS (SEF)

Durante este último año se ha continuado con la aplicación de la técnica SEF (Surface-enhanced Fluorescence) sobre NPs en suspensión coloidal. Este método ha permitido el estudio de la adsorción y agregación de fármacos, especialmente el fármaco antitumoral emodina, y el fármaco anti-inflamatorio piroxicam sobre nanopartículas metálicas. Asimismo, se ha encontrado que la funcionalización de nanopartículas metálicas es crucial en SEF, ya que la intensificación de la fluorescencia requiere de un cierto distanciamiento del fluoróforo respecto al metal. La interacción de estos fármacos con albúmina da lugar a una consiguiente intensificación de los espectros SEF, que conjuntamente con los espectros SERS, los espectros de dicroísmo circular y los de fluorescencia de vida media, han dado lugar a importantes resultados sobre los cambios estructurales que sufren estos sistemas una vez adsorbidos sobre la superficie metálica.

APLICACIÓN DE NANOSENSORES BASADOS EN SERS PARA LA DETECCIÓN DE FÁRMACOS EMPLEADOS EN DOPAJE DEPORTIVO

Se ha avanzado notablemente en la línea de investigación consistente en la aplicación de la técnica SERS en la caracterización de fármacos empleados en dopaje deportivo (FEDD) a cargo de la doctoranda Irene Izquierdo. Durante el 2010 se han publicado los primeros espectros SERS obtenidos para alguna de estas sustancias a bajas concentraciones. Se trata concretamente de los β -agonistas clenbuterol, salbutamol y terbutalina, así como de aminoglutetimida, inhibidor de aromatasas empleado en deportistas para evitar la pérdida de masa muscular. El empleo de NPs de Ag con forma de prismas triangulares ha permitido rebajar de forma sensible el límite de detección de estos compuestos hasta niveles nunca antes detectados mediante las técnicas convencionales. Asimismo, la detección de FEDDs mediante SERS se produce de manera unívoca, ya que los espectros SERS constituyen auténticas huellas dactilares del compuesto. Para profundizar este estudio se ha llevado a cabo también un estudio teórico de los modos vibracionales y un estudio de las isoterms de adsorción de los fármacos investigados sobre NPs metálicas. Finalmente se ha llevado a cabo con éxito la detección de nandrolona, un FEDD que no se puede detectar directamente sobre NPs, gracias a la funcionalización de la superficie con ciclodextrinas unidas a DTC.

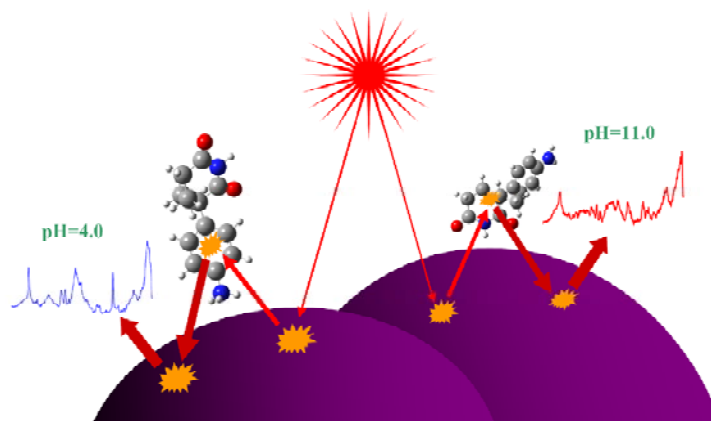


Figura: detección de aminoglutetimida, un fármaco antitumoral, empleado también en dopaje deportivo, sobre nanopartículas plasmónicas de Au. La detección es sensible a las diferentes posibles adsorciones sobre la superficie, en función del pH.

TÉCNICAS LÁSER APLICADAS AL ESTUDIO Y A LA CONSERVACIÓN Y RESTAURACIÓN DE OBRAS DE ARTE Y MONUMENTOS

Durante este año se han publicado los resultados obtenidos en la aplicación del método de inducción de NPs de Ag mediante fotorreducción in-situ para el estudio y detección de pigmentos orgánicos en fibras naturales sin necesidad de extracción. Concretamente, los resultados publicados han consistido en el análisis de pigmentos rojos de naturaleza antraquinónica, como alizarina y carmín. Los resultados encontrados mediante el SERS se han comparado con los

obtenidos por técnicas cromatográficas convencionales, lo que ha permitido deducir la localización de estos pigmentos en los materiales anteriores sin necesidad de aplicar métodos de extracción.

Dentro de esta línea de investigación se ha avanzado notablemente en la aplicación de espectroscopías SERS y SEF al estudio de pigmentos orgánicos sintéticos, a cargo de la doctoranda Elena del Puerto. Los pigmentos estudiados son fundamentalmente derivados de la quinacridona, conocidos por su gran durabilidad, en parte debida a su gran insolubilidad en medio acuoso, lo que dificulta notablemente su caracterización mediante técnicas espectroscópicas. Se han ensayado métodos de caracterización consistentes en la funcionalización con calixarenos de distinto tamaño (de 4 y 8 anillos bencénicos) encontrando una correlación entre la cavidad de la molécula hospedadora y el pigmento. La adsorción de estas moléculas mediante películas Langmuir-Blodgett ha permitido también su caracterización y también realizar un estudio de la variación de la emisión SERS y SEF en función de la distancia del pigmento con respecto a la superficie. Durante este año se ha extendido esta investigación a dos nuevos pigmentos derivados de quinacridona de interés en el desarrollo de sistemas OLED (Organic Light Emission Diodes), en concreto la dimetilquinacridona y dicloroquinacridona, que ya han sido caracterizadas mediante los correspondientes espectros SERS y SEF.

La espectroscopia Raman y la técnica SERS también han sido aplicadas en el estudio de pigmentos contenidos en manuscritos islámicos antiguos de Marruecos. En este sentido la aplicación de la técnica SERS ha sido de gran utilidad en la identificación de los pigmentos rojos y amarillos de naturaleza orgánica, que no pueden ser caracterizados mediante técnicas convencionales debido a la alta emisión de fluorescencia de estos colorantes.

Finalmente, en relación con el Patrimonio, durante el 2010 se ha continuado con la aplicación de la espectroscopia Raman en la caracterización de materiales de construcción. Dentro de este campo se ha comenzado a desarrollar una nueva línea de investigación consistente en el análisis de los aditivos moleculares orgánicos añadidos a los morteros y hormigones, para mejorar sus propiedades reológicas. Se están estudiando tres tipos de aditivos: a) sulfonatos de melamina (tradicionales); b) lignosulfonatos (subproductos naturales) y c) policarboxilatos (última generación). Los aditivos estudiados poseen una estructura compleja puesto que suelen ser mezclas de varios compuestos. Se han obtenido los espectros Raman y se está trabajando en la obtención de los espectros SERS de estos compuestos. Se ha llevado a cabo un análisis de los modos vibracionales con el fin de elucidar su estructura y hacer un seguimiento de los cambios estructurales encontrados al variar parámetros como el pH (fundamental en la fase acuosa del hormigón) o la interacción con los componentes del cemento. En general las moléculas de los aditivos presentan una parte apolar y otra polar y sería esta última con la que interaccionaría con los componentes del cemento.

La adquisición de un Espectrómetro Renishaw Raman “inVia” Reflex con excitaciones a 442, 325, 532 and 785 nm y Sistema de Imagen Espectroscópica StreamLine a través del programa EQUIPA del IEM para el año 2010 ha supuesto un reconocimiento por parte del CSIC a la labor investigadora del grupo de investigación de Espectroscopia en superficies metálicas y fotónica de plasmones.

RESONANCIAS PLASMÓNICAS EN NANOESTRUCTURAS METÁLICAS

Dentro de las actividades propias del proyecto *NANOPLAS* (NANoantenas Ópticas PLASmónicas), hemos demostrado teóricamente que sustratos metálicos con forma de flor (o estrella) de dimensiones nanométricas pueden ser utilizados para experimentos de detección Raman (SERS) de una sola molécula. Esto se debe a la enorme intensificación del campo electromagnético, a modo de lupa nanométrica, que se produce sobre la superficie de las nanoflores sobre las que se adhieren las moléculas; esto ocurre a determinadas frecuencias de la luz, resonantes con las oscilaciones del plasma electrónico del metal (resonancias plasmónicas).

Por otro lado, se ha encontrado un análogo en el régimen de terahercios equivalente a las nanoantenas metálicas en el visible. Se trata de microestructuras elongadas (con la misma forma pero 10^3 veces mayores) fabricadas con semiconductores, que se comportan en esa zona del espectro electromagnético (THz) como los metales en el visible. Esto se ha realizado en colaboración con los grupos del Dr. Jaime Gómez Rivas FOM-Institute AMOLF (Amsterdam) y Philips Research Labs (Eindhoven), y del Dr. Stefan Maier (Imperial College, London, UK).

METAMATERIALES EN EL DOMINIO ÓPTICO

Dentro de las actividades contempladas en el proyecto CONSOLIDER-INGENIO *EMET* (Engineering METAmaterials), hemos investigado las propiedades ópticas de medios con respuesta magnética negativa ($\mu < 0$), que no existen de manera natural pero pueden obtenerse a partir de metamateriales. Se ha extendido el formalismo de scattering del teorema de Green, incluyendo una discontinuidad en la permeabilidad magnética μ (isótropa y homogénea). Para ello, hemos empleado las condiciones de continuidad o saltos para el campo EM en las interfases entre medios con diferentes ϵ y μ . Se ha realizado un análisis numérico para el problema del scattering de luz linealmente polarizada incidiendo sobre superficies aleatoriamente rugosas con μ negativa, con especial interés en el fenómeno de *enhanced backscattering*

(retroreflexión reforzada). Esto se ha realizado en colaboración con el grupo de los Profs. Fernando Moreno y Francisco González del dpto. de Física Aplicada de la Universidad de Cantabria

2A.5 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR

LÍNEAS DE INVESTIGACIÓN:

- Simulación de reacciones de polimerización y de propiedades físicas de polímeros.
- Propiedades físicas y nanoestructura de polímeros.
- Física de polímeros: Movilidad y orden en sistemas macromoleculares.
- Aplicación de la luz sincrotrón al estudio de polímeros y materiales nanoestructurados.
- Intercaras.

SUBLÍNEAS DE INVESTIGACIÓN:

- Nanoestructura de películas delgadas poliméricas.
- mecánicas.
- Primeros estadios de la cristalización de polímeros sometidos a campos de deformación de tipo cizalla.
- Estudio de la nanoestructura de materiales multilaminares mediante dispersión de rayos X a ángulos ultra-pequeños (USAXS).
- Desarrollo de la estructura y propiedades de polímeros naturales y nanocompuestos.
- Procesos de recristalización en sistemas semirrígidos.
- Fenómenos de precrystalización, cristalización y transiciones de fase en polímeros sintéticos y naturales.
- Estudio de las reacciones de polimerización mediante cálculos mecano-cuánticos.
- Simulación jerarquizada de dinámica macromolecular.
- Nuevas poliolefinas con arquitectura controlada: estructura y propiedades.
- Dinámica molecular y propiedades viscoelásticas.
- Procesos de extrusión en mezclas de poliolefinas.
- Dinámica molecular y propiedades dieléctricas.
- Interrelación estructura-dinámica en materia condensada blanda polimérica.
- Microscopía electrónica de transmisión: Estudio estructural tridimensional de macromoléculas biológicas.
- Biofísica.

TÉCNICAS UTILIZADAS:

- o 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.
- o Calorimetría diferencial de barrido.
- o Dispersión cuasielástica de neutrones (IQNS).
- o Microscopía óptica y de barrido (SEM).
- o Espectroscopía Raman.
- o Micro- y nano-dureza.
- o Dispersión de neutrones.
- o Espectroscopía dieléctrica de banda ancha.
- o Reometría de cizalla en torsión dinámica y continua.
- o Reometría de extrusión capilar y elongacional.
- o Análisis dinamo-mecánico en flexión.
- o Análisis mecánico en tracción: módulo elástico.
- o Análisis mediante fraccionamiento por temperatura de cristalización.
- o Microscopía electrónica de barrido y transmisión (STEM) y de fuerzas atómicas (AFM).
- o Cromatografía de permeabilidad en gel (GPC) y dispersor de luz multiángulo (MALLS) a alta temperatura.
- o Dispersión dinámica de luz laser (DLS).

LABOR INVESTIGADORA:

ESTUDIO DE LA NANOESTRUCTURA Y LA ESTABILIDAD TÉRMICA EN PELÍCULAS MULTILAMINARES POLIMÉRICAS AMORFAS

Se ha analizado, por primera vez, mediante dispersión de rayos X a ángulos ultra-pequeños (USAXS) la estructura nanolaminar de dos polímeros inmiscibles amorfos, forzados a adoptar dicho ensamblaje mediante la técnica de coextrusión multiplicadora. Se ha observado que los largos espaciados de la serie de películas estudiadas de polimetacrilato de metilo y poliestireno (PMMA/PS) muestran una muy buena correlación con los valores de las periodicidades nominales de los apilamientos de láminas alternantes de PMMA y de PS. Además, los largos espaciados derivados de áreas localizadas mediante AFM también concuerdan satisfactoriamente con los resultados de USAXS, que son valores promediados de regiones mucho más grandes. Se ha investigado la variación estructural, después de un tratamiento térmico, de dos muestras cuyas periodicidades nominales se aproximan a los 200 nm. Después de calentar las películas en el rango de temperaturas entre temperatura ambiente y 140°C, se ha comprobado mediante AFM que la estructura nanolaminar se mantiene mayoritariamente intacta. Sin embargo, la ausencia anómala de máximos de USAXS en un pequeño intervalo de temperaturas incluido en el anterior, se ha explicado de forma tentativa por medio de un modelo en el que las superficies interlaminares se vuelven irregulares y presentan efectos de desmojado espinodal (“spinodal dewetting”). Para tratamientos por encima de 140°C, la ruptura gradual de láminas a partir de procesos interfaciales concluye con la desaparición de la estructura multilaminar.

EFFECTOS DE DIMENSIONALIDAD FINITA EN SISTEMAS POLIMÉRICOS MULTILAMINARES: DESARROLLO DE LAMINILLAS CRISTALINAS BAJO CONFINAMIENTO FÍSICO

Se ha investigado, mediante medidas calorimétricas, la variación de la temperatura de transición vítrea y el proceso de cristalización en láminas ultrafinas (unas pocas decenas de nm) de politereftalato de etileno (PET) en función del espesor de las láminas. Estas láminas se hallan constreñidas entre láminas de policarbonato (PC), formando el conjunto un sistema multilaminar de PET/PC. Los resultados se han discutido en términos de espesor reducido y efectos interfaciales. Se ha explorado la aparición y la evolución de orientación de laminillas cristalinas de PET durante la cristalización isoterma a partir del estado vítreo utilizando la técnica de dispersión de rayos X a ángulos pequeños (SAXS) en tiempo real. El análisis de los datos de SAXS ha puesto de manifiesto que los efectos de dimensionalidad finita dificultan el proceso de cristalización. Sin embargo, la estructura final de laminillas cristalinas es similar, tanto para el caso de PET nanolaminar, como para el mismo material en volumen. Los resultados sugieren que la inserción de laminillas es un mecanismo presente durante la cristalización, así como un cierto engrosamiento de las mismas. Se ha llegado también a la conclusión de que aparecen dos poblaciones de laminillas cristalinas diferentes: una, con sus superficies basales perpendiculares al apilamiento de las láminas, se encuentra próxima a las intercaras; otra población de cristales, con las superficies basales paralelas a las láminas, está situadas en el interior y su desarrollo parece estar determinado por las condiciones de confinamiento.

INVESTIGACIÓN DE LA MICRODUREZA DE MATERIALES TERMOPLÁSTICOS NANOESTRUCTURADOS

Se ha investigado el comportamiento micromecánico de varios materiales nanocompuestos de matriz termoplástica con la ayuda de la técnica de microdureza. Los materiales estudiados han sido un sistema de copolímeros en bloque de estireno-butadieno separados en microfases y varios compuestos termoplásticos reforzados con cargas de tamaño nanométrico de dimensionalidad variable. Se ha encontrado que la microdureza de los nanocompuestos está fuertemente condicionada por las dimensionalidades de la carga. Las cargas uni- y bidimensionales presentan una mucho mejor capacidad de refuerzo que las tridimensionales, debido a su gran relación superficie/volumen. En el caso de copolímeros en bloque nanoestructurados, la microdureza no sólo está determinada por la composición total de poliestireno/polibutadieno sino que disminuye gradualmente con la presencia de cadenas de polibutadieno libremente suspendidas, incluso cuando la morfología de los sistemas permanece invariable.

ESTUDIO DE LA MORFOLOGÍA Y LA NANOESTRUCTURA DE NANOFIBRAS DE NYLON/GRAFENO

Se han investigado la morfología y la nanoestructura de una serie de membranas producidas por la técnica de electrohilado, constituidas por nanofibras de nylon/grafeno en las cuales se varía la proporción de grafeno. Se ha podido determinar que el proceso de electrohilado altera la nanoestructura de la poliamida. Estudios de difracción de rayos X han puesto de manifiesto que la fracción de material cristalino, el tamaño lateral de cristal y el espesor de los cristales de poliamida es menor en las nanofibras de nylon 66 que el característico de una película del mismo material preparada mediante moldeo en el fundido. El grado de incorporación del grafeno a la nanofibras se pudo investigar asimismo mediante estudios de microscopía electrónica. Finalmente, se ha podido determinar que la estructura cristalina del nylon se ve afectada por la presencia del grafeno, observándose un progresivo aumento de la distancia entre átomos que interaccionan mediante puentes de hidrógeno con el contenido de grafeno.

ESTRUCTURA Y PROPIEDADES MICROMECAÑICAS DE MEZCLAS DE POLI(ETILEN TEREFTALATO) RECICLADO CON POLIOLEFINAS. EFECTO DEL COMPATIBILIZADOR SEBS-MAH

Se han investigado mezclas binarias de poli(etilen tereftalato) (PET) reciclado con polipropileno isotáctico (iPP), y con polietileno de alta densidad (HDPE), preparados en la Universidad de Sétif (Argelia). Se trata, en ambos casos, de mezclas incompatibles. Sin embargo, la adición a estas mezclas de SEBS-MAH (copolímero en bloque estireno-etileno/butileno-estireno injertado con anhídrido maleico) en diferentes proporciones da lugar a su compatibilización, como demuestra el estudio llevado a cabo mediante difracción de rayos X a ángulos altos (WAXS), calorimetría diferencial de barrido (DSC) y medida de la microdureza. También se han estudiado el efecto de la adición de arcilla en diferentes proporciones a las mezclas anteriores. En el caso de las mezclas PET/iPP, la presencia de arcilla parece tener un efecto nucleante sobre el iPP, aumentando la cristalinidad y la microdureza de las mezclas compatibilizadas. Por el contrario, la cristalinidad de todas las mezclas PET/HDPE (puras, con compatibilizador, o con compatibilizador y arcilla) depende solamente de su composición.

RELACIÓN PROPIEDADES MICROMECAÑICAS-NANOESTRUCTURA EN POLIÉSTERES ALIFÁTICOS BIODEGRADABLES

Se ha estudiado un conjunto de poliésteres alifáticos biodegradables, sintetizados por el equipo del Prof. Kricheldorf, de la Universidad de Hamburgo (Alemania). Las técnicas utilizadas: difracción de rayos X a ángulos de Bragg grandes (WAXS) y pequeños (SAXS), DSC, y medida de la microdureza, nos han permitido determinar los grados de cristalinidad y tamaños de cristal de las diferentes muestras, así como su correlación con la microdureza. Las diferencias entre las propiedades térmicas y mecánicas de estos poliésteres y las exhibidas por los poliésteres aromáticos se explican por la diferente naturaleza química de las unidades monoméricas.

ESTUDIO DE “COMPOSITES” DE POLIPROPILENO ISOTÁCTICO CON ARCILLA, Y CON BIÓXIDO DE TITANIO

Se trata de materiales compuestos de iPP con arcilla, o con bióxido de titanio, TiO_2 , preparados por un equipo de la Universidad de Dhaka (Bangladesh). El estudio se ha llevado a cabo mediante WAXS, SAXS, DSC y medida de la microdureza. Los resultados obtenidos indican que la microestructura y la microdureza, tanto del iPP puro como de los “composites”, dependen de la temperatura de procesado del material, y de su velocidad de enfriamiento desde el fundido. En el material lentamente enfriado, la presencia de cantidades crecientes de aditivo provoca una disminución de la cristalinidad del iPP y de la microdureza del material. Este efecto es notablemente mayor en las muestras con arcilla que en las que contienen TiO_2 . Por otro lado, en las muestras enfriadas rápidamente preparadas con arcilla la cristalinidad aumenta con el contenido de la misma, mientras que en las basadas en TiO_2 el comportamiento es el contrario. La dureza de todas las muestras enfriadas rápidamente aumenta con el contenido en aditivo, con independencia de su naturaleza.

ALGUNOS ASPECTOS INTERESANTES DEL ENTRECRUZAMIENTO REVERSIBLE DE POLIPROPILENO ISOTÁCTICO

Hemos continuado la línea de investigación sobre el polipropileno isotáctico entrecruzado de modo reversible según el método desarrollado por el Dr. Saïd Bouhelal, de la Universidad de Sétif (Argelia). En colaboración con otros grupos de investigación, hemos llevado a cabo cuatro estudios en paralelo sobre el polipropileno isotáctico entrecruzado, que llamaremos XiPP: 1) Influencia del contenido en agentes entrecruzantes y 2) influencia de un proceso de entrecruzamiento repetido sobre la microestructura del XiPP; 3) posible uso de estas composiciones como “master batches” para mejorar las propiedades del iPP, incluso degradado; 4) efecto del número de ciclos de extrusión sobre las características del XiPP para comprobar su capacidad de auto-reparación. Las muestras se han caracterizado mediante las siguientes técnicas: WAXS, DSC, análisis térmico mecánico dinámico DMTA, resonancia magnética nuclear ^{13}C NMR, espectroscopía infrarroja por transformada de Fourier FTIR, y medida del “Melt Flow Index” MFI. Los resultados obtenidos demuestran que la microestructura del iPP no experimenta cambios de importancia ni por la adición de agentes de entrecruzamiento en diferentes proporciones, ni después de someter el material a varios procesos de entrecruzamiento sucesivos, lo que implica un elevado número de ciclos de extrusión. Además, se evidencia la posibilidad de utilizar el XiPP como “master batch” que puede ser añadido a un iPP sin modificar en diferentes proporciones.

NANOESTRUCTURACIÓN DE POLÍMEROS EN 3D

Mediante nanopartículas. Se han usado nanotubos de carbono como plantillas para controlar la nanoestructura intrínseca de los polímeros semicristalinos con el fin de optimizar las propiedades físicas de los sistemas nanocompuestos. En concreto, se prepararon mediante polimeración in-situ, nanocompuestos de Poly(ethylene terephthalate) (PET), y nanotubos de carbono de pared simple (SWCNT) como aditivo. Se ha encontrado que las ondulaciones de la estructura de los nanotubos tienen influencia en las propiedades mecánicas y que cierto grado de agregación de los SWCNT mejora las propiedades ópticas e incrementa la conductividad eléctrica. Asimismo, siguiendo esta línea se ha investigado la dinámica segmental de la goma natural y vulcanizada en una serie de nanocompuestos

con nanoarcillas. Los resultados revelan que ni la concentración ni el tipo de arcilla modifica la dinámica segmental, relacionada con la viscosidad, del sistema. Por el contrario la dinámica de la cadena, relacionada con la fluidez, se ve ralentizada por la presencia de las nanoarcillas. Hemos atribuido este efecto a una localización de cadenas de goma natural en la intercara goma/arcilla. Siguiendo esta línea, en colaboración con el grupo de polímeros y micro-fluidos del departamento de ingeniería química del Imperial College London (Londres, Reino Unido), hemos estudiado la dinámica a distintas escalas espaciales y temporales de una familia de nano-compuestos formada por poli(estireno) y nano-partículas de C60. Las herramientas experimentales utilizadas fueron principalmente la dispersión de neutrones, la calorimetría diferencial de barrido y la espectroscopia dieléctrica. Las nano-partículas de C60 inducen un incremento de la temperatura de transición vítrea de la matriz de poli(estireno), o lo que es lo mismo, una ralentización de la dinámica segmental de las cadenas de poli(estireno), mientras que en el estado vítreo se ha observado un reblandecimiento del material a altas frecuencias a través de medidas del factor de Debye-Waller. Estos efectos se han interpretado en base a un mayor impedimento en el empaquetamiento de las cadenas debido a la presencia de las nano-partículas, causando además un aumento de la fragilidad dinámica en la formación del vidrio. Nuestros resultados, en combinación con información previa, demuestran que la fragilidad del sistema formador de vidrio puede modelarse en función de la elección de la nano-partícula lo cual posee importantes implicaciones en las propiedades mecánicas, permeabilidad y otras propiedades físicas del nano-compuesto. También se han estudiado, mediante dispersión de rayos X a ángulos ultra bajos (USAXS), la influencia que el tipo de partícula, tiene sobre la reología de una matriz polimérica. En este caso las nanopartículas han sido óxidos de hierro y las matrices redes poliméricas interpenetrantes de poly(N-isopropylacrylamide) (PNiPAAm). La combinación de USAXS y reología han permitido determinar cuando las partículas de óxido de hierro se enlazan con la matriz polimérica y cuando están simplemente encajadas en la misma.

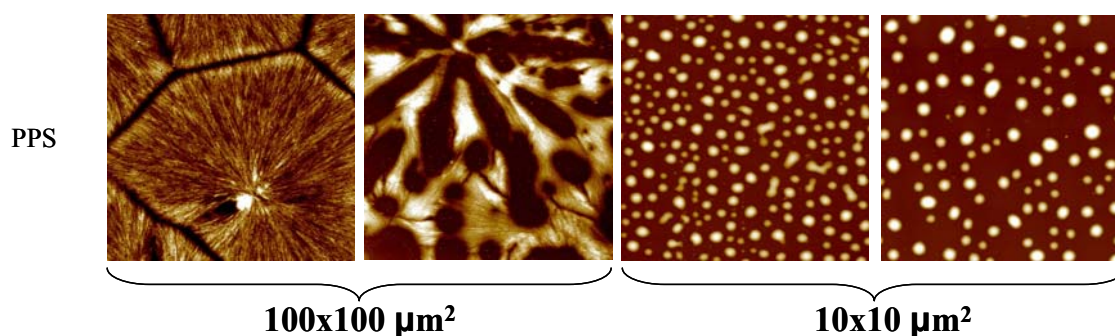
Polímeros semicristalinos. Dentro de la investigación encaminada a dilucidar la interrelación volúmica (3D) entre la nanoestructura intrínseca de un polímero semicristalino y la dinámica segmental se ha investigado, mediante mediadas simultáneas de dispersión de rayos X y espectroscopia dieléctrica, la cristalización del Poly(trimethylene terephthalate)(PTT). La simultaneidad de ambas medidas ha permitido dilucidar el efecto que la formación de cristales ejerce sobre la dinámica molecular de la fase amorfa remanente. Esta dinámica es la responsable de las propiedades mecánicas a temperatura ambiente de la mayoría de los polímeros semicristalinos. El PTT es un poliéster aromático que presenta mejores propiedades físicas y de procesado en comparación con PET comúnmente usado en la industria en la actualidad. Nuestros experimentos demuestran que la homogeneidad estructural, reflejada en la distribución de fase cristalina embebida en la fase amorfa, es mejor que en el caso de su homólogo PET.

Autoensamblado en copolímeros dibloque. Los diagramas de fases de copolímeros en bloque formados por dos componentes se han estudiado mediante dispersión de rayos X a bajo ángulo (SAXS) y calorimetría diferencial de barrido (DSC). Mediante las medidas de SAXS se han determinado las temperaturas de transición orden-desorden y las morfologías adoptadas por dichos sistemas tras el proceso de segregación de fases. Para realizar las medidas con suficiente resolución temporal y en temperatura, estas medidas de dispersión de rayos X a bajo ángulo se han realizado en la línea española BM16 del sincrotrón europeo ESRF. Los sistemas se han estudiado tanto en el límite de segregación débil, caso del copolímero dibloque formado por poli(estireno) y poli(etil metacrilato) PS-b-PEMA, como en el límite de segregación fuerte como es el formado por poli(estireno) y poli(dimetil siloxano) (PS-b-PDMS). El sistema PS-b-PEMA se autoensambla mediante calentamiento dando lugar a una estructura laminar en la que el espesor de los dominios puede ajustarse de forma controlada mediante tratamientos térmicos a distintas temperaturas y tiempos. Una vez caracterizada la estructura, la dinámica de las cadenas de poli(etil metacrilato) se ha explorado selectivamente mediante espectroscopia dieléctrica de banda ancha, observándose una ralentización de la dinámica segmental y cambios en la energía de activación aparente de la relajación α por comparación con el homopolímero de poli(etil metacrilato). En colaboración con el grupo del profesor Enrique Vallés de la Universidad Nacional de Sur en Argentina, se ha realizado también el estudio del diagrama de fases de copolímeros dibloque formados por poli(estireno) y poli(dimetil siloxano), mediante dispersión de rayos X a ángulos bajos (SAXS), y la nanoestructura de una serie de los copolímeros di-bloque, (PS-b-PDMS). Los resultados revelan que las muestras con alto contenido en PDMS presentan una morfología laminar mientras que las demás presentan una fase hexagonal de cilindros de PDMS embebidas en una matriz de PS.

NANOESTRUCTURACIÓN DE POLÍMEROS EN 2D

Se ha comenzado un estudio sistemático de la nanoestructura y el desarrollo de la misma en nanofilms de polímeros semicristalinos preparados mediante el método de spin-coating. Los polímeros investigados han sido una familia de poliésteres alifáticos biodegradables y biocompatibles basados en el propilendiol y un diácido con número variable de grupos CH_2 como son polipropilén succinato (PPS), polipropilén glutarato (PPG), polipropilén adipato (PPA) y polipropilén azelato (PPAz). La morfología se ha investigado mediante microscopía de fuerzas atómica (AFM) y dispersión de rayos X con incidencia rasante a ángulos bajos (GISAXS) y altos (GIWAXS). Los experimentos de AFM muestran la existencia de una estructura esferulítica que da estabilidad al film hasta un espesor de 15 nm. Para espesores más pequeños los films son inestables y se producen efectos de “dewetting”. Los experimentos de dispersión de rayos X han revelado que en todos los poliésteres investigados salvo en el PPAz los cristales se disponen con el eje de cadena paralelo al sustrato dando lugar a una morfología de tipo “edge-on”. En el PPAz la situación es inversa y la morfología

es de tipo “flat-on”. El efecto repulsivo del segmento alifático frente al sustrato de silicio es responsable de este cambio de morfología.



Imágenes de microscopía de fuerzas atómicas (AFM) mostrando la transición de morfología esferulítica a nano gotas poliméricas de Poly(propileno succinato) (PPS) en nanofilms con espesor decreciente de izda. a dcha.

NANOESTRUCTURACIÓN DE POLÍMEROS EN 1D

Se han preparado plantillas inorgánicas con objeto de confinar y nanoestructurar polímeros en su interior. Debido a la importancia que tiene en este apartado la plantilla hemos acometido la caracterización mediante GISAXS de una serie de membranas de óxido de titanio preparadas mediante deposición física en fase de vapor y con incidencia oblicua (GAPVD). Las membranas consisten en columnas inclinadas con porosidades en el rango de los nanómetros. Ha sido la primera vez que se ha usado GISAXS para la caracterización morfológica de este tipo de membranas.

Se han preparado y caracterizado nanotubos y nanocilindros de polifluoruro de vinilideno (PVDF) obtenidos mediante infiltración de disoluciones poliméricas en membranas porosas de óxido de aluminio con nanoporos cilíndricos. Mediante la técnica de micro-difracción de rayos X con luz sincrotrón (línea ID13 del European Synchrotron Radiation Facility (ESRF) en Grenoble) se comprobó que el confinamiento espacial del polifluoruro de vinilideno (PVDF) en los poros de la membrana y las interacciones polímero-alúmina inducen una transición de fase parcial de la forma cristalina apolar a la forma ferroeléctrica, así como efectos de orientación de los cristales imponiendo una morfología de tipo “flat-on”.

CARACTERIZACIÓN DE COLOIDES DE INTERÉS BIOLÓGICO Y LIPOPLEXOS

En colaboración con el departamento de Química Física de la UCM, Madrid, se ha realizado un estudio sistemático de la estructuración de liposomas compuestos por un lípido catiónico (DC-CHol) y un zwitteriónico (DOPE) en presencia de ADN. Mediante dispersión de rayos X a bajo ángulo se ha determinado el efecto de la composición lipídica en la estructura de estos lipoplexos y se ha comparado con el diagrama de fases teórico obteniéndose un acuerdo muy satisfactorio.

INVESTIGACIÓN DE LA CONDUCTIVIDAD ELÉCTRICA EN MATERIALES COMPUESTOS POLIMÉRICOS CON NANOFIBRAS DE CARBONO ÓPTIMAMENTE DISPERSADAS

Se ha llevado a cabo la funcionalización de nanofibras de carbono (GANF, suministradas por la empresa Grupo Antolín Ingeniería, SA) con diferentes reactivos: amoníaco, ozono y ácido nítrico. A continuación, se han preparado materiales compuestos poliméricos constituidos por poliamida 66 (PA66) y diferentes cantidades de GANF funcionalizada. Para ello, se han seguido diferentes métodos de procesado: mezclado en fundido, por disolución y polimerización *in situ*. Los materiales se han caracterizado morfológicamente (microscopía óptica, SEM) y también se han determinado sus propiedades térmicas (DSC) y eléctricas (espectroscopia dieléctrica). Los resultados obtenidos se han comparado con los correspondientes a las nanofibras sin tratar. Se ha concluido que con el proceso de funcionalización las propiedades no sólo no mejoran sino que, como en el caso de las eléctricas, incluso empeoran. La explicación a este hecho podría ser la rotura que experimentan las fibras durante el tratamiento, lo que conduciría a una disminución de la relación de aspecto. Para cumplir el objetivo del proyecto PET2007_0186_03, en el que se contempla la optimización del procedimiento para la obtención de materiales con buenas propiedades conductoras a bajos niveles de carga, se ha desarrollado un nuevo método que consiste en esencia en la mezcla física de la matriz polimérica, en forma de polvo y la nanofibra de carbono y posterior moldeo. De esta forma, hemos preparado sistemas compuestos que presentan buena propiedades eléctricas con umbrales de percolación muy inferiores a los conseguidos por el procedimiento de procesado en fundido, que tradicionalmente viene empleándose en la industria del sector.

SIMULACIÓN Y EXPERIMENTOS DE LOS PROCESOS DE POLIMERIZACIÓN Y LOS FENÓMENOS FÍSICOS EN SISTEMAS MACROMOLECULARES

Catalizadores y polimerización.

Experimentalmente se ha mostrado que los catalizadores aldimino PymNox (Ni²) son incapaces de incorporar monómeros polares tales como el MA, mientras que los catalizadores Ni¹ metil-sustituídos (acetaldimino PymNox) son capaces de copolimerizar. La reactividad de ambos catalizadores ha sido examinada mediante modelos DFT. Se propone un mecanismo de Curtin-Hammett para explicar la diferente reactividad de ambos catalizadores en la copolimerización de etileno/MA. Los resultados indican que los sustituyentes metilo en Ni¹ introducen un impedimento estérico que al catalizador más adecuado para la incorporación de monómeros polares. Este modelo da nuevas pistas para el diseño de catalizadores de copolímeros polares basados en etileno.

Dinámica molecular en el fundido y procesos de cristalización.

Se han diseñado simulaciones Monte Carlo (MC) de las dimensiones moleculares y de la dinámica del fundido de cadenas de polímeros lineales y con ramificaciones corta (SCB) con el fin de establecer el efecto de la arquitectura molecular en las propiedades del fundido. Esta estrategia permite evaluar la densidad y el empaquetamiento intermolecular en el fundido mediante un mapeo de las simulaciones MC en el modelo de longitud de empaquetamiento. Los resultados obtenidos ilustran la dependencia de las dimensiones de cadena, propiedades de enmarañamiento y tiempos de relajación característicos con la arquitectura molecular en consonancia con los resultados experimentales. Por otra parte, se han realizado simulaciones de dinámica molecular sobre proceso de cristalización en disolución para diferentes grados de polietileno. Esta estrategia fue diseñada para entender el papel de las SCB en la formación de dominios ordenados. La temperatura de cristalización, la cristalinidad y la densidad en las simulaciones disminuyen al aumentar el número de ramificaciones, en buen acuerdo con los experimentos. La formación de orden en los copolímeros se ve afectado por la cantidad de SCB en la cadena. En las simulaciones las SCB se mueven hacia la superficie de plegado. En todos los casos, se observa que las ramas C₄ se excluyen de las regiones ordenadas, coincidiendo con los resultados experimentales.

MOVILIDAD, ORDEN Y NANOESTRUCTURA EN SISTEMAS MACROMOLECULARES

Se ha realizado un exhaustivo estudio sobre las propiedades físicas de modelos moleculares de poliolefinas sus mezclas tanto en el estado fundido como en el estado sólido. El estudio de las propiedades en el fundido de los modelos homogéneos ha permitido distinguir y separar entre efectos de características moleculares que normalmente se confunden: las colas de alto peso molecular y la ramificación de cadena larga. En este contexto se pueden establecer correlaciones, que, apoyadas por los resultados obtenidos en simulaciones atomísticas, permiten explicar el comportamiento de los materiales a partir de sus propiedades moleculares. En cuanto a las propiedades en el estado sólido se ha llevado a cabo un estudio exhaustivo mediante calorimetría diferencial de barrido, rayos X de ángulo alto, espectroscopía Raman y análisis dinamo-mecánico que permite ahondar sobre el conocimiento de la compleja estructura de fases de estos sistemas modelo, que puede ser modulada en función de su arquitectura molecular, y de la que dependerán por tanto las propiedades finales.

SIMULACIÓN DE SISTEMAS BIOMACROMOLECULARES

Los receptores de cannabinoides CB1 y CB2 son una clase importante de proteínas transmembrana involucradas en un buen número de procesos biológicos. A pesar de su inherente similaridad estos receptores se encuentran en diferentes entornos celulares, CB1 localizado en el cerebro y CB2 en células asociadas al sistema inmunitario. Además, la actividad de CB1 ha sido asociada a la presencia de rafts lipídicos al contrario que CB2. Se ha llevado a cabo una simulación de dinámica molecular de varios nanosegundos sobre las conformaciones inactivas de ambos receptores insertados en una bicapa lipídica de POPC. La estructura global de la proteína se mantiene a lo largo de la simulación en ambos casos, pero se han observado importantes diferencias en la interacción lípido-proteína. CB1 tiende a distorsionar la regularidad de la bicapa lipídica, especialmente en la zona extracelular, mientras que CB2 presenta una influencia menor en la distribución de lípidos en el plano de la bicapa. Esta observación es consistente con algunos hechos experimentales relacionados con la interacción lípido-proteína en estos receptores de cannabinoides. Por otro lado, se ha realizado un muestreo por simulación del dipéptido de alanina en disolución empleando la plataforma de computación ciudadana Ibercivis. La presencia de conformaciones tipo Y es un resultado inesperado que resulta ser confirmado mediante cálculos mecano-cuánticos y datos experimentales de cristalografía de rayos X y RMN en disolución de fragmentos proteicos presentes en la base de datos de fragmentos aleatorios de proteínas. El acuerdo entre los mapas de Ramachandran simulados y experimentales es excelente.

BIOFÍSICA: ESTRUCTURA TRIDIMENSIONAL E HIDRODINÁMICA DE PROTEÍNAS Y COMPLEJOS BIOMACROMOLECULARES

El estudio de la estructura y propiedades biofísicas de macromoléculas biológicas como las proteínas permite obtener información sobre cuál es su función en su contexto biológico. Con este fin, se han estudiado proteínas relacionadas con cascadas de señalización celular eucariota mediante las técnicas de microscopía electrónica tridimensional y dispersión de luz dinámica. Gracias a estos estudios hemos podido aportar información sobre las dimensiones globales de estos complejos macromoleculares e identificar como se organizan en el espacio. Las macromoléculas sometidas a estudio están implicadas en proceso tan importantes para la célula como son procesos de detección de señales externas, adaptación al medio y transformación celular. El estudio estructural de estas macromoléculas biológicas nos permitirá arrojar luz sobre como realizan sus funciones en la célula.

CHAPTER 2B
RESEARCH ACTIVITIES

2B.1 THEORETICAL PHYSICS AND CHEMISTRY DEPARTMENT

RESEARCH LINES:

- Gravitation and Cosmology.
- Condensed Matter Theory.
- Quantum Integrability and Exactly Solvable Models.
- Theoretical Nuclear Physics: Structure and Reactions.
- Theoretical Physical-Chemistry applied to Astrophysics.

RESEARCH SUBLINES:

- Classical and quantum general relativity.
- Loop quantum gravity and cosmology.
- Black hole analogues in condensed matter.
- Computational methods in gravitational physics.
- Strongly correlated and mesoscopic systems.
- Electronic and elastic properties of graphene.
- Exactly solvable models.
- Large scale calculations in low dimensional systems.
- Thermalization, decoherence and quantum phase transitions.
- Hierarchical mean field.
- 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 of molecular species relevant for astrophysics and atmosphere.
- Inelastic non-reactive collisions at low temperatures.

EMPLOYED TECHNIQUES:

- Theoretical and mathematical physics.
- Computational methods.
- Renormalization group methods.
- Selfconsistent mean field calculation techniques.
- Numerical methods to solve the Faddeev equations in coordinate space.
- Hyperspherical adiabatic expansion method.
- High level ab initio calculations.

RESEARCH ACTIVITY:

ELECTRONIC AND ELASTIC PROPERTIES OF GRAPHENE

During 2010 we have continued our investigation of the properties of graphene. This material, made of a single layer of carbon atoms with honeycomb structure, is currently attracting much attention in the condensed matter community, both for the theoretical challenges it presents as well as for its potential for technological application. We have pursued different lines of research, devoted in particular to understand the role of the electronic correlations and to explain the intrinsic corrugation of graphene from the interplay of electronic and elastic degrees of freedom.

Regarding the study of the electronic correlations, we have investigated the development of a gapped phase in the low-energy theory of Dirac quasiparticles with long-range Coulomb interaction. The case of Quantum Electrodynamics in 2+1 dimensions can serve as a good example of this phenomenon, by which the original $U(N)$ chiral symmetry of the theory with N massless two-component Dirac fermions is spontaneously broken below a critical number of flavors. We have shown that, in the large- N approximation, an excitonic gap can only appear in low-energy theory of graphene below $N = 32/\pi^2$, that is exactly half the value found in Quantum Electrodynamics at the same number of dimensions. This implies that, given the physical value $N = 4$, the electronic spectrum should remain gapless even for the largest interaction strength attained in suspended graphene. This is in agreement with the fact that no evidence of transition to an insulating state has been found in experiments carried out with free-standing samples. Anyhow, we have also given evidence that the chiral symmetry should be broken

at sufficiently small values of N , as the order parameter of the transition turns out to diverge at a certain critical coupling in the ladder approximation. A natural prediction from our analysis is that the gapped phase should emerge at some point in the way from $N = 4$ to $N = 1$. The spin degree of freedom can be frozen for instance by applying a magnetic field, and it is actually very appealing to think that the metal-insulator transition observed in that case in graphene may rest on this effect of chiral symmetry breaking. It remains to be seen whether quenching the remaining Dirac-valley degree of freedom could also lead to an insulating state for accessible values of the interaction strength, in accordance with the results of our study.

On the other hand, graphene can be considered as a prototype of electronic crystalline membrane, where the mobile electrons are strongly coupled to the phonons of the two-dimensional lattice. A remarkable and unexpected property observed in graphene is its tendency to develop ripples, or long wavelength modulations of the out-of-plane displacements, by which the system freezes into a corrugated average configuration. Ripples are an important feature of graphene, as they are expected to have a significant impact on transport properties, and their origin has been heavily debated. In exfoliated graphene, ripples are correlated to some extent with the irregularities of the substrate. But it has been also observed, mainly from experiments in suspended graphene, that they also arise in part as an effect intrinsic to the crystalline membrane.

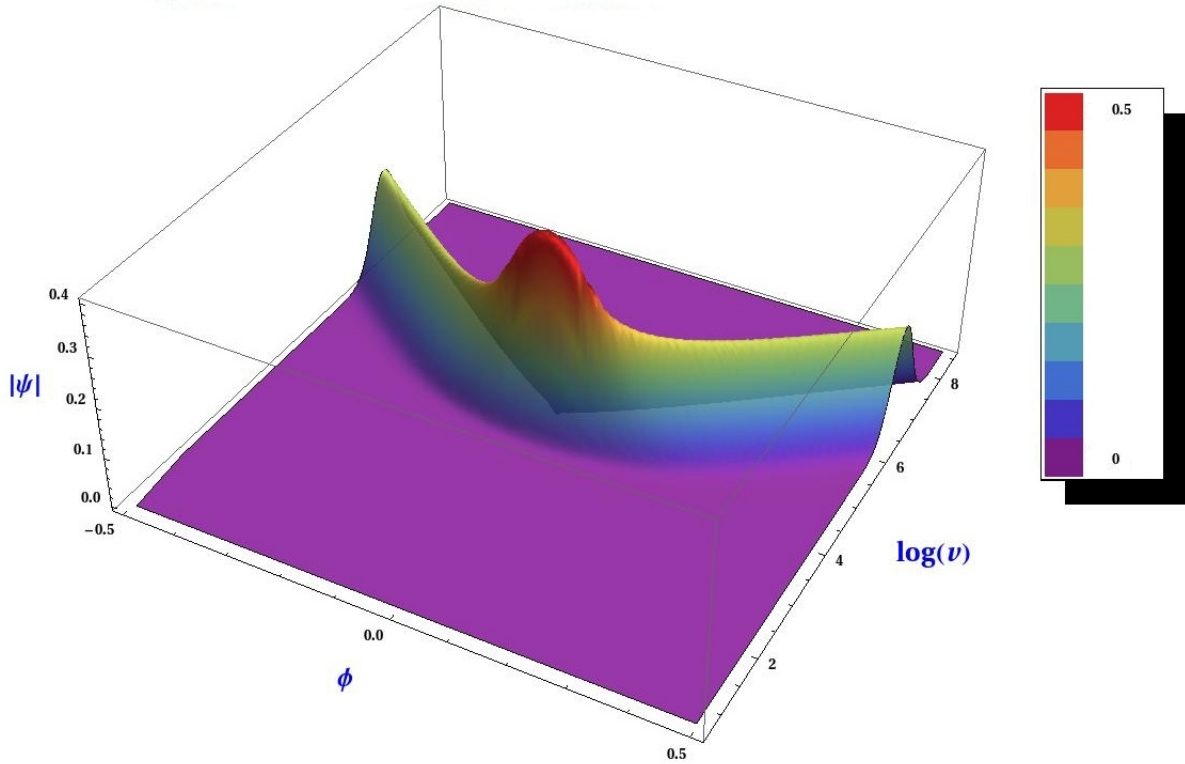
In our work, we have focused on the behavior of graphene as an electronic membrane in order to investigate the rippling instability. A key observation is that the studies of more conventional membranes have shown that these have in general a flat phase with increasing rigidity over large length scales. We have then argued that the novel factor peculiar of graphene, the mobile electrons, must play an important role in the ripple formation mechanism. Within the framework of quantum many-body theory, we have devised a self-consistent approach supplemented by a renormalization group method to evaluate the contribution of the electrons to the phonon self-energy corrections. The nonperturbative character of this approach has allowed us to find a critical value of the electron-phonon coupling at which the effective bending rigidity of the membrane vanishes. This effect takes place at zero temperature and corresponds then to the transition to a new ground state of the system, characterized by the spontaneous breakdown of the translational symmetry of the flat membrane. We have shown that this follows a mechanism similar to that responsible for the condensation of the Higgs boson field in elementary particle physics, with an order parameter given in graphene by the square of the gradient of the flexural phonon field. The effective potentials for both quantum fields (the vertical displacement in graphene, the Higgs field in relativistic physics) have actually the same typical "mexican-hat" shape, which makes the unstable state at the top to spontaneously decay by rolling down to a lowest-energy state with broken symmetry (the aggregate of ripples in one case, the Higgs condensate filling the vacuum in the other). We have shown that the analogue goes even further, since graphene has a control parameter (the tension of the membrane) that plays the same role as the mass square for the Higgs field, driving the instability in the case of compression (negative tension). Choosing suitable values of the parameters, we have seen that the proposed model leads to a predicted buckled phase which is consistent with experimental observations of the ripples, illustrating another way to employ graphene as a test ground of fundamental concepts in theoretical physics.

QUANTUM GRAVITY

During the year 2010 we have continued with our work on black hole entropy in loop quantum gravity with the goal of understanding its behavior, as customarily defined in this framework, for small horizon areas. In particular we have developed several statistical methods necessary to obtain a smoothing of the very complicated black hole degeneracy spectrum (and its integrated version giving the entropy). The smoothed approximations can be successfully used to understand the behavior of the entropy for large areas. The main idea makes use of modified generating functions for the black hole entropy that are designed to allow the extraction of relevant statistical information (the mean and the variance of the distribution defining the peaks in the degeneracy spectrum). At the present moment there is an essentially complete understanding of the structure of the entropy as a function of the area.

Regarding our work on the quantization of symmetry reductions of general relativity we have completed a paper for the series of Living Reviews on Relativity on the quantization of midisuperspace models. These are symmetry reductions of general relativity with an infinite number of physical degrees of freedom. In contrast with the more familiar minisuperspace models these are genuine field theories and, in many instances, keep a residual diffeomorphism invariance. For these reasons this kind of models constitutes a very good testbed for quantization techniques and plays a central role in the current work on loop quantum gravity and cosmology. Being a review, the paper does not give new results but, rather, gives a comprehensive view of the field that takes into account all the relevant approaches to the subject including both the more traditional geometrodynamical methods and the ones inspired in loop quantum gravity.

Concerning specifically the application of the loop quantization techniques to such midisuperspaces, we have continued the development of the quantization of Gowdy cosmologies which contain linearly polarized gravitational waves. Actually, we have completed their quantization using a hybrid approach which combines a loop quantization of the zero modes of the geometry with a Fock quantization of the modes which describe inhomogeneities of the gravitational field. We have successfully implemented the new prescriptions for an improved dynamics in loop quantum cosmology, determined the structure of the superselection sectors of the model, proven that the initial value problem is well posed in the quantum theory, and found the Hilbert space of physical states. Besides, we have carried out a numerical analysis of the corresponding effective dynamics, showing that the (initial) cosmological singularity is eluded and replaced with a quantum bounce. Furthermore, this big bounce scenario is not qualitatively affected by the presence of inhomogeneities. We have studied also the behavior of the inhomogeneous modes through the bounce, showing that their amplitudes are preserved statistically, except when they are small, case in which they are amplified by the bounce. This is the first study of the behavior of inhomogeneities in a fully quantized model within the framework of loop quantum cosmology.



Quantum bounce of the wave function of the universe ψ for a Friedmann-Robertson-Walker spacetime with a scalar field ϕ . v corresponds to the volume of the universe in Planck units.

The choice of the Fock quantization in the proposed hybrid approach to inhomogeneous quantum cosmology is based on some uniqueness theorems about quantum scalar fields in non-stationary backgrounds recently proven by us. We have demonstrated that the selection of both a field description (among the family of fields related by time dependent canonical transformations), and of a Fock representation for it, is fixed up to unitary equivalence if one demands invariance of the vacuum under the symmetries of the field equations and unitarity of the dynamical evolution (in the deparametrized theory). These theorems remove the field theory ambiguities in the quantum predictions, e.g., for inhomogeneous fields in cosmological backgrounds and for cosmological perturbations about Friedmann-Robertson-Walker spacetimes.

Another line of research that we have developed is the study of gravitational analogs in condensed matter theory. Fluctuations around a Bose-Einstein condensate can be described by means of Bogoliubov theory or by means of nontrivially modified Klein-Gordon equation. The concepts of quasiparticle derived from both approaches are actually the same. In a stationary configuration containing an acoustic horizon, there are several possible choices of a regular vacuum state, including a regular generalization of the Boulware vacuum. Issues such as Hawking radiation crucially depend on this vacuum choice. On a different front, we have determined the degree of entanglement of a bipartite system Alice-Rob (when Rob is in the proximities of a Schwarzschild black hole while

Alice is free falling into it) as a function of the distance of Rob to the event horizon, the mass of the black hole, and the frequency. All the interesting phenomena occur in the vicinity of the event horizon and the presence of event horizons do not effectively degrade the entanglement when Rob is far off the black hole. On the other hand, the vacuum state can evolve to an entangled state in a dynamical gravitational collapse. We have shown that this entanglement could even reach the maximal entanglement limit for low frequencies or very small black holes. It provides quantum information resources between the modes in the asymptotic future (thermal Hawking radiation) and those which fall to the event horizon. We have also shown that fermions are more sensitive than bosons to this quantum entanglement generation.

EXACTLY SOLVABLE MODELS

Using the exact solution of the $SO(8)$ model of proton-neutron pairing we study the precision of the BCS and number projected BCS approximations in finite size systems. By taking into account finite size effects and solving the Richardson-Gaudin equations for large systems we showed that the proton-neutron BCS approximation is exact in the thermodynamic limit.

We studied the p -wave pairing realization of the hyperbolic Richardson-Gaudin model describing spinless cold atom systems. These systems are characterized by a topological phase, and differently from s -wave systems that have a quantum phase transition between a superconducting phase and a Bose-Einstein condensate of dipolar molecules. The exact solution allowed us to establish that the phase transition is of 3rd order and to interpret it as a confinement-deconfinement transition as viewed from the exact wave function.

HIERARCHICAL MEAN FIELD

By means of the Hierarchical Mean Field approximation developed in our group, we studied the J-Q model of quantum magnetism, recently proposed as an example of system having a deconfined quantum critical point. In our representation we find a 2nd order quantum phase transition between a Neel state and scalar plaquette phase, contradicting previous numerical results and starting a debate about the characteristics of this quantum phase transition. Moreover, there are discrepancies about the magnitude of the critical coupling that differs in one order of magnitude between the different treatments.

LARGE SCALE CALCULATIONS IN LOW DIMENSIONAL SYSTEMS

We have studied the separation between the charge and color degrees of freedom in systems of ultracold trapped fermionic atoms with three different hyperfine states generalizing for these systems the phenomenon of spin-charge separation that appears in strongly correlated one-dimensional systems. We have performed large-scale simulations by means of the time-dependent density matrix renormalization group algorithm. We have observed the different velocities of displacement of the charge and color excitations. We have explored the differences between attractive and repulsive interactions and we have studied the effects of the anisotropy of the interactions.

QUANTUM TRANSPORT

We have calculated the full conductance distribution of disordered quantum wires in the presence of a time-periodic field. Our calculations were based upon Floquet theory and the scaling theory of localization. The effects of the field in the conductance statistics are very strong, specially in the high-frequency limit where the conductance distribution shows a sharp cut. In this regime, the conductance can be written as the product of two terms, one frequency-dependent and one field-independent with the information of the disorder of the system. We used the solution of the Mel'nikov equation to calculate the distribution of the conductance for an arbitrary strength of the disorder. For low frequencies, we find that the conductance distribution and the Floquet mode correlations can be described by the solution of the Dorokhov-Mello-Pereyra-Kumar equation with an effective number of channels. In the regime of strong localization, that can be induced either by the disorder or by the driving the conductance distribution is a log-normal distribution. We have verified our theoretical results with numerical calculations in the Anderson model.

THERMALIZATION, DECOHERENCE AND QUANTUM PHASE TRANSITIONS

We have studied non-equilibrium dynamics and thermalization in an interacting spin system, which transits from integrability to chaos. The integrable limit consists of the Elliptic Gaudin model; the transition towards chaos was achieved by means of perturbing the former. The main results obtained are the following: a) quantum chaos does not guarantee thermalization; b) in spite of it is possible to find several constants of motion in the non-integrable cases, they store less information about the initial state than in the integrable case, and c) the mechanisms of thermalization are in agreement with the Eigenstate Thermalization Hypothesis.

PARITY VIOLATION IN ELASTIC ELECTRON SCATTERING FROM NUCLEI

Knowledge of the neutron density distributions in atomic nuclei is of fundamental importance to understand basic aspects of the nuclear structure, but contrary to what happens with proton distributions, the experimental information available on neutrons is still clearly insufficient. Improving our knowledge of the neutron density distributions in nuclei is one of the major challenges in present nuclear structure activities. Progress on our knowledge of the neutron densities has been limited by the use of hadronic probes that are subject to large and controversial uncertainties because of the not well known reaction mechanism and the interaction itself. This situation has led to a further consideration of leptonic probes to investigate neutron distributions.

During the last year, we have investigated an exciting new possibility to measure neutron form factors from the asymmetry in parity-violating (PV) elastic polarized electron scattering. The electroweak experiments can be both accurate and model independent and the data can be interpreted with as much confidence as electromagnetic scattering. PV electron-nucleus scattering arises from the interference of the electromagnetic and the weak neutral amplitudes and it is a clean and powerful tool for measuring the spatial distribution of neutrons in nuclei with unprecedented accuracy.

In our theoretical approach, the nuclear structure calculation involved in the asymmetry is performed within a selfconsistent deformed mean field method based on Skyrme forces with pairing correlations. Isovector and isoscalar densities and form factors in $N > Z$ and $N = Z$ stable nuclei have been discussed taking ^{208}Pb and ^{28}Si as examples. The isospin mixing produced by the Coulomb interaction in the ground state of $N = Z$ nuclei with Skyrme selfconsistent mean fields was also discussed. Distorted wave calculations of parity violating asymmetries were shown and compared to plane wave impulse approximation. The extraction of the ratio between neutron and proton monopole form factors was also discussed.

SHAPE TRANSITIONS IN NEUTRON-RICH ISOTOPES

The study of the nuclear shape evolution as the number of nucleons changes is nowadays a highly topical issue in nuclear physics from both theoretical and experimental points of view. Especially interesting are those situations where the nuclear structure suffers drastic changes between neighbor nuclides. This is the case of the neutron-rich isotopes with masses around $A=100$. These structural variations lead often to sudden changes of particular nuclear properties that can be used as signatures of phase/shape transitions.

During the last year we have studied the bulk and spectroscopic properties of neutron-rich even-even and odd- A isotopes in this mass region within the selfconsistent Hartree-Fock-Bogoliubov (HFB) approximation based on the finite range and density dependent Gogny energy density functional (EDF). In addition to the well known D1S parametrization of the Gogny-EDF, we also consider the most recent parametrization D1M. From this comparison we evaluate not only the robustness of our results, but we also explore the capability of D1M to account for the phenomenology of odd- A nuclei, not so well studied yet. The description of the odd- A nuclei involves additional difficulties because the blocking procedure requires the breaking of time-reversal invariance, making the calculations arduous. In the present study we use the equal filling approximation (EFA), a prescription widely used in mean-field calculations to preserve the advantages of time-reversal invariance.

We have analyzed various sensitive nuclear properties, such as two-neutron separation energies, charge radii, and the spin-parity of ground states in a search for signatures of shape transitions. We have found clear signatures of a sharp shape transition at $N=60$ in both charge radii and spin-parity of the ground states, which are robust, consistent to each other, and in agreement with experiment. We point out that the combined analysis of these two observables could be used to predict unambiguously new regions where shape transitions might develop.

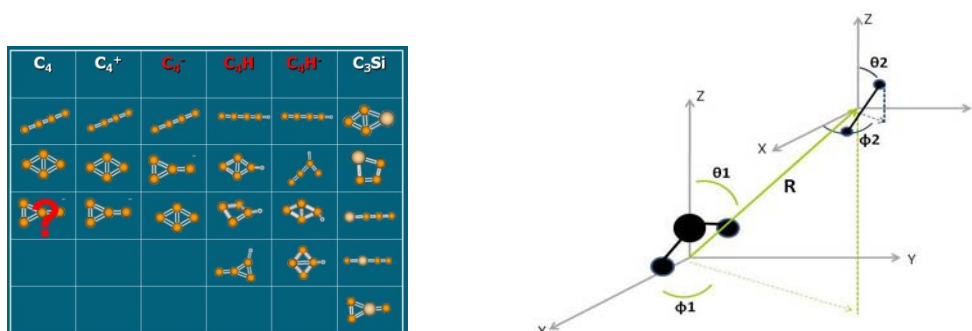
CONTINUUM THREE-BODY WAVE FUNCTIONS: RESONANCES, DECAY MODES, AND REACTIONS

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

THEORETICAL PHYSICAL-CHEMISTRY APPLIED TO ASTROPHYSICS

During the year 2010, we have performed molecular studies within the three sub-lines of research carried out by our group: molecular spectroscopy of prebiotic non-rigid molecules of astrophysical interest; structural and spectroscopic characterization of semi-rigid species of astrophysics and atmospheric importance and determination of cross sections in non reactive inelastic collisions at very low temperatures. In all these works, high-level ab initio calculations are used as a basic tool to determine potential energy surfaces and molecular structures. From these methods and with our ro-vibrational codes ENEDIM and FIT-SPEC we predicted many spectroscopic properties. Molecules and the problems addressed are relevant to the study of the gas phase chemistry of the interstellar and circumstellar media and planetary atmospheres. Research carried out within the scientific exploitation of new observatories Herschel and ALMA programs.

In recent years, we have been developing very detailed studies focused to the characterization of carbon-chains of astrophysical importance. Carbon-chains are relevant isolated species as well as important intermediates of formation processes of large molecules such as the PAHs and Fullerenes. We have studied with very precise methods small size chains that are relatively abundant in carbon rich sources. We initiated the sequence by pure chains type C_n with a reduced number of atoms (n) and likely to be detected with infrared techniques using the instruments of the new Herschel Space Observatory. Currently, we are studying neutral and charged chains type C_nX_m ($X = Si, S$ or H) and type $SiNH_n$. These species, which are difficult to be treated at the laboratory level for its low stability, have permanent dipole moment and are therefore detectable through radio astronomy. They are therefore relevant species with a view to the future project ALMA. We provided special attention to the anions due to the recent interest awoken in the astrophysical community, studying C_4H^- (detected by IEM astronomers) and anions type SiC_n and SiC_nH . We have identified isomeric structures, potential energy surfaces for the first electronic states, as well as rovibrational properties including anharmonicity effects. We provide possible isomerization processes and predict Renner-Teller and rovibronic effects.



The isomers of pure carbon-chains and silicon carbon-chains; spatial representation of the collisional system SO_2+H_2

For the ALMA project science exploitation, it is necessary to understand the millimeter and sub-millimeter spectra of non-rigid molecules containing the most abundant interstellar elements C, N, O and H. Many of these molecules are classified as prebiotic. They show very low energy vibrational levels that can be populated at very low temperatures. These levels correspond to the large amplitude vibrations that inter-transform minimum energy structures through feasible potential energy barriers. Given the astrophysical interest, we are studying with very precise initio method the torsional and bending modes of dimethyl-ether and methyl format. Recently, UREA has been proposed as possible interstellar molecule, whereas the corresponding gas phase far infrared are not well explored. We carry out this work in collaboration with the University of Huelva and the University of Lille.

Finally, the collisional study of SO_2 with ortho- H_2 and para- H_2 has been completed at very low temperatures. Determination of the collisional parameters for abundant species in astrophysical sources and molecular hydrogen is essential to understand the observed intensities. These depend on the populations of the levels, which are the result of radiative and collisional excitations and de-excitations. We are studying sulphur oxides and carbon-chains. The parameters are obtained in molecular dynamics calculations using as input, Van der Walls potential energy surfaces. These are determined with very accurate ab initio calculations. The theoretical study of SO_2 has allowed to predict transitions and a new maser motivating new astrophysical observations that have demonstrated the accuracy of the theoretical predictions.

2B.2 NUCLEAR PHYSICS AND STATISTICAL PHYSICS

RESEARCH LINES:

- Experimental Nuclear Physics.
- Study of excited states and nuclear resonances.
- Nuclear Structure studied in reactions with stable and exotic nuclei at low, medium and relativistic energies.
- Computing simulations using R3BRoot for nuclear physics experiments.
- Systems devoid of long-range order.
- Advanced instrumentation.

RESEARCH SUBLINES:

- Experimental studies of light nuclei close to and beyond the driplines.
- Beta decay studies of dripline nuclei.
- R&D for FAIR (Facility for Antiprotons and Ion Research).
- Study of the nuclear breakup mechanism by multiparticle detection.
- 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.
- Nuclear structure Physical behavior at nano-scales.
- Microscopic structure and dynamic of disordered condensed matter.
- Advanced instrumentation development for neutron sources.

EMPLOYED TECHNIQUES:

- Beta decay studies at ISOL facilities, ISOLDE and REX-ISOLDE@CERN.
- Reaction studies at low energy at the 5MV accelerator CMAM@UAM.
- Reaction studies at relativistic energies, the R3B experiment at GSI.
- GEANT4 Montecarlo simulation of experimental set-up and detectors.
- Electronic and mechanical design of experimental set-up.
- Mathematics and computing methods.
- Analysis of experiments in experimental nuclear physics.
- Numerical simulation.
- Neutron Scattering.
- Calorimetric techniques.
- Absorption techniques.

RESEARCH ACTIVITY:

CHARACTERIZATION OF NUCLEAR STATES RELEVANT IN STELLAR NUCLEAR-SYNTHESIS PROCESSES

Along the years we have developed techniques that allow us to go deeply into the decay modes of exotic nuclei, and especially to learn about the breakup of unbound states. In the previous annual reports of 2003-2009 we informed about the study in full kinematics of the 3-alpha breakup of the levels of ^{12}C -populated in the β^+ -decay of ^{12}N and β^- -decay of ^{12}B . And the study of the breakup of the low energy levels of ^9Be relevant to the $^4\text{He}(\alpha, \gamma)^9\text{Be}$ reaction rate. This reaction is an alternative to the triple-alpha fusion in neutron-rich stellar scenarios. Complementary to this work we have studied the reaction $^{10}\text{B}+^3\text{He}$ whose channels through states in ^{12}C and ^9B provide information on excited states not accessible to the beta decay thus a complete picture of the structure of these nuclei can be obtained. This work is based on experiments conducted at the Nuclear Physics line at the Tandetrón installed in the CMAM, UAM. During 2010 the final analysis of these experiments have been made and published as: *Breakup of ^{12}C resonances into three alpha particles* (Phys. Rev. C81, 064313, (2010)) and *R-matrix analysis of the decays of ^{12}N and ^{12}B* (Phys. Rev C81, 024303, (2010)). It was part of the PhD work

of our I3P-CSIC fellow, Martín Alcorta, who defended his thesis with the title *Nuclear Structure of ^{12}C from 3-Body break-up Studies by light ion reactions in complete kinematics* in April 2010.

The study of beta-delayed charged particles is a wonderful tool to get information on excited states and their decay modes and mechanisms. Along this research line we have studied the beta decay of ^{17}Ne at ISOLDE (CERN). This is the lightest bound isotope of Neon and decay both by beta-delayed protons and alphas. To know which one occurs first is of astrophysical relevance. The experimental apparatus consisted of a hemisphere of Si-detectors of 15 cm radius. This setup allows for time-of-flight studies that permit to distinguish proton from alphas. The study of the spectrum in term of R-matrix allows for the determination of branching ratios and the energies of the intermediate states in ^{17}F , ^{16}O , ^{13}N and ^{12}C involved in the process. This work together with the study of beta-delayed process of light-argon isotopes (Phys. Rev. C81, 024311, (2010)) was the subject of the Ph.D. work of our FPI fellow, Ricardo Domínguez Reyes, with the title: *Emisión de partículas tras la desintegración β^+ en núcleos deficientes en neutrones: ^{17}Ne , ^{32}Ar y ^{33}Ar* , which he defended in December 2010.

The reaction $^4\text{He}(^3\text{He},\gamma)^7\text{Be}$ is of great astrophysical interest as constitutes one of the main source of uncertainties of the solar neutrino flux coming from the decay of ^8B produce in the $^7\text{Be}(p,\gamma)^8\text{B}$ reaction. Thus the reaction cross section at different energies and the extrapolated astrophysical factor $S_{34}(0)$ are of great importance for the astrophysical models. The $^4\text{He}(^3\text{He},\gamma)^7\text{Be}$ reaction cross section was measured at CMAM at the end of November 2009 at several energies between 2.3 and 5.3 MeV. The ^7Be produced in the reaction was collected in the Cu-foil. By counting the number of incoming projectiles and knowing the thickness of the target plus the ^7Be ions produced the cross section was extracted for each energy, and the $S_{34}(0)$ derived. The analysis has been done during 2010 and presented by our JAE-predoc student Mariano Carmona to get the DEA in June 2010.

DIPOLE POLARIZABILITY STUDY OF HALO NUCLEI

One of the most important and unexpected discoveries of Nuclear Physics in recent years has been the existence of the neutron halo in some nuclei near or at the drip line. A halo state is basically a threshold effect resulting from the presence of bound states near the continuum. The combination of a small binding energy together with the short-range of nuclear forces allows the nucleon (or a cluster of nucleons) to go far away and to have a non negligible probability at distances much greater than the normal nuclear radius ($= r_0 A^{1/3}$, $r_0 = 1.2$ fm).

We proposed an experimental and theoretical study of the scattering of halo nuclei at energies near the Coulomb barrier. Our aim is to determine the effect of dipole polarizability, i.e., the distortion suffered by the nucleus during the collision due to the strong electric field of the target. This effect should be particularly large for nuclei with halo and should manifest as a reduction of the elastic cross section at large angles. This project is carried out in collaboration with groups from the Universities of Seville and Huelva, with whom we have associated units. We have studied two neutron halo nuclei such as ^6He , see 2006 annual report, and in 2008 we measured ^{11}Li at TRIUMF (Canada). The analysis of the Triumf data is now in an advanced state and forms the PhD work of our student (grant CSIC-Costa Rica) Mario Cubero, that he should defend by the end of 2011. As follow-up we had submitted and defended a new proposal to the TRIUMF Facility dedicated to do a complete study of the dynamics of the 1-neutron halo ^{11}Be on a strong Coulomb field. The proposal was approved in July 2010.

COMPLETE BETA-DECAY STUDY OF THE $N=Z$ NUCLEUS ^{72}Kr

The aim of this work is to determine the sign of the deformation or the degree of shape mixing of the $N=Z=36$ ^{72}Kr ground state. To this purpose we plan to deduce the B(GT) distribution by the measurement of the beta-decay of ^{72}Kr with a Total Absorption Spectrometer (TAS), the “Lucrecia” TAS at ISOLDE [2]. To perform a meaningful analysis of these data certain details of the low spin states at low excitation energy need to be clarified, in particular the properties of the isomeric state at 101 keV in the daughter nucleus ^{72}Br and the degree of gamma-CE competition of the low energy transitions.

For this reason, measurements were carried out in two steps: 1º) the beta-gamma emission was detected by the TAS detector “Lucrecia” and 2º) the conversion electrons were measured using a mini-orange spectrometer with three sets of magnets covering different energy ranges and two HPGe detectors. The analysis of the former measurement depends on the results obtained with the latter. The data has been analysed and constituted the research project of our FPI-student J.A. Briz to obtain his DEA in June 2010. As result of the work the experimentally determined conversion coefficients of eight low energy transitions in ^{72}Br was determined. As consequence the spin of low lying states were fixed. In particular, this new measurements allow us to establish the disputed ground state spin-parity of ^{72}Br .

TRANSFER REACTIONS WITH NEUTRON-RICH RADIOACTIVE BEAMS AT REX-ISOLDE, CERN

Single-nucleon transfer reactions constitute an excellent tool to study single-properties of nuclear states. In particular they provide essential data to study the evolution of shell structure and of effective single-particle

energies away from the line of beta stability. Dr. A. Jungclauss and Dr. R. Orlandi (member of our group since June 2010 who just won a Postgraduate CPAN contract which started in Jan 2011), are involved in the study of single-nucleon transfer reactions at REX-ISOLDE. The experiments exploit the coupling of the T-REX Si array to the MINIBALL germanium detector array. R. Orlandi was actively involved in the setup and running of two such experiments: the study of ^{46}Ar produced via the $^{44}\text{Ar}(t,p)$ reaction, and the study of ^{79}Zn via the $^{78}\text{Zn}(d,p)$ reaction, which both took place in October 2010. It is worth mentioning that for the second experiment R. Orlandi was also the spokesperson, leading a collaboration of 12 institutes involved in the measurement. The data is being analysed in Madrid, and preliminary results which indicate that experiment was successful have already been presented at the ISOLDE Workshop and User Meeting in December 2010. On the same topic, our group is also leading a letter of intent for transfer reactions for the HIE-ISOLDE upgrade at CERN, which will take place in the next few years.

MAGNETIC MOMENT MEASUREMENTS USING TRANSIENT FIELD TECHNIQUES

The measurement of the magnetic moments of excited nuclear states is of high interest because they give direct information concerning the structure of the state of interest, i.e. its wave function, and therefore allow for severe tests of different theoretical models. If the state of interest has a short lifetime in the picoseconds range the strong transient fields have to be employed in order to induce a measurable effect during the short interaction time between the magnetic moment and the magnetic field.

This technique has successfully been employed to measure the magnetic moments of the first excited 2^+ states in stable tin isotopes (together with their lifetimes discussed above) at GSI Darmstadt. Our PhD student Jennifer Walker finished the analysis of these data in 2010 and is currently preparing her PhD thesis which she will defend in May 2011 at the Universidad Autónoma de Madrid. In parallel the results are being prepared for publication in Phys. Rev.C. While this transientfield technique is well established for stable ion beam experiments only very recently first experiments have been realized employing them in combination with radioactive ion beam both at low (ISOLDE) and high (fragmentation) energy.

In 2010 we have been working in the design of a new target chamber for g-factor measurements with low-energy radioactive beams which will be used in 2011 to perform the approved experiment at REX-ISOLDE to measure g-factors in $^{72,74}\text{Zn}$. This experiment will form part of the PhD thesis of Andrés Illana Sison who started to work with us in November 2010.

For the realization of a second approved g-factor measurement with radioactive beams, this time at relativistic energies at the FRS (GSI, Darmstadt), which will be performed with in the PRESPEC campaign in 2011, a second new target chamber had to be designed last year which incorporates an electromagnet and liquid nitrogen cooling.

In addition, in October 2010 we run an experiment at the UNILAC accelerator at GSI, Darmstadt, Germany, to search for the 2^+ mixed-symmetry state in ^{90}Sr , produced by alpha transfer. States with proton-neutron mixed symmetry have been defined in the framework of the interacting boson model with proton-neutron degree of freedom (IBM-2). The structure and the characteristics of these states are determined by the effective p-n correlations in the valence shell of collective nuclei. Although some of these states are predicted to decay via strong M1 transitions, no MSSs have ever been solidly identified in unstable nuclei on the basis of large absolute M1 transition rates. The data are being analysed by a Ph.D. student in the nuclear physics group in Darmstadt, group with which we have a long standing collaboration on this type of measurements.

LIFETIME MEASUREMENTS IN TIN ISOTOPES

Lifetimes of excited states are crucial for the understanding of the structure of a certain nucleus of interest because they yield very direct information about the wavefunction of the state and therefore allow for stringent tests of different theoretical calculations. In case that the lifetime of the state of interest is very short, in the range of ps or even below, techniques based on the Doppler Effect have to be employed to measure its lifetime. In 2010 we finished the analysis of the lifetime data obtained in two experiments employing the Coulomb excitation of stable tin beams realized at the UNILAC accelerator (GSI, Germany) in 2007 and 2009. Our results (published in Phys. Lett. B695 (2011) 110) indicate a minimum of $B(E2)$ transition strength from the ground state to the first excited 2^+ state in these semi-magic nuclei around neutron mid-shell - in contradiction with the expectation from both a simple seniority scheme as well as large-scale shell model calculations. These results call for further theoretical and experimental investigation. To further follow this interesting topic we prepared a proposal to study some of these stable tin isotopes in a complementary way at TRIUMF which got approved in November 2010 and will most probably be performed in 2011 (spokespersons: Kris Starosta from SFU Vancouver and A. Jungclauss).

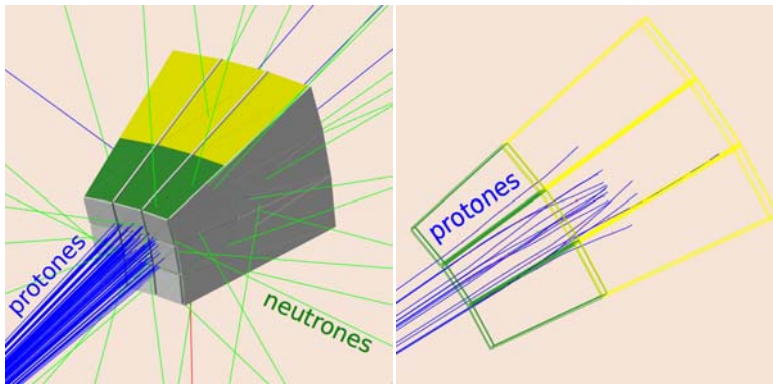
NUCLEAR STRUCTURE AT HIGH ANGULAR MOMENTUM IN OSMIUM AND IRIDIUM ISOTOPES

In 2010 our PhD student Victor Modamio finished the analysis of data taken in an experiment performed at the LNL Legnaro (Padova, Italy) using an incomplete fusion reaction to study the high-spin structure of some Os and Ir isotopes. As the latest result he was able to identify a new high-spin isomer in ^{187}Ir and in addition to study the

quasiparticle-vibration coupling in this nucleus. These results have been published in Phys. Rev. C81 (2010) 054304 and in April 2010, Victor Modamio defended his PhD work at the Universidad Complutense de Madrid.

R+D FOR THE R3B EXPERIMENT AT THE FUTURE FAIR FACILITY

R+D work is performed within the R3B collaboration at FAIR (Facility for Antiprotons and Ion Research), where our work concentrates on the developments for the CALIFA gamma and proton spectrometer that is to surround the target position in the R3B experiment. Our work is centered on two separate parts: 1) developments for the FrontEnd Cap of CALIFA, where a new concept using scintillators composed of two crystals (Phoswich) is being investigated. A one composed crystal prototype has been tested in our lab and at CMAM for low and high energy gammas and at the TSL laboratory in Uppsala for high energy (180MeV) protons. Further, simulations of the Phoswich detector composed of 3cm LaBr₃(Ce) + 5cm LaCl₃(Ce) is being made, together with simulations for the construction of a prototype CEPA build from 9 phoswich crystals, see figure. The first objective was to separate and to identify the pulses of each individual crystal of the Phoswich, using one single readout. This objective was obtained with success, 2) The second line of developments is related to the electronic readout of the central part of CALIFA, the Barrel. The crystals of CsI are coupled to Large Area Photo Diodes (LAPD), which are highly sensitive to the applied voltage and to the environmental temperature. We are developing a temperature controlled stabilization system of the applied voltage, the first modules have been tested successfully showing that the resolution of the crystals can be maintained over a long period of time.



Geant4 simulation of 150 MeV protons impacting on the Phoswich Prototype CEPA, which we are designing, composed of 9 crystals of 4cm LaBr₃(Ce) + 6cm LaCl₃(Ce).

R3BROOT: DEVELOPMENT OF A SIMULATION FRAMEWORK

R3BRoot, a novel analysis and simulation tool is under development and certain parts have been improved during this year. The program uses Geant4 as simulation engine and ROOT as analysis tool. The code allows to simulate the detector set-ups and nuclear physics experiments to be performed at the R3B set-up at FAIR. One of these detectors is the gamma calorimeter CALIFA. CALIFA is made of two parts, a barrel that covers the polar region from 40° to 130° and an end-cap that extends from 6° to 40°. The forward part of the detector is extremely complex due to the Doppler Effect suffered by the particles in these reactions at relativistic energies. A proper design of the end-cap demands for an improvement of R3BRoot code. Some novel end-cap geometries have been incorporated into the code and interactions at R3B typical energies and gammas in the designed end-cap have been studied. Using R3BRoot, photo-peak efficiencies and energy and spatial distribution of protons and gammas in the end cap have been obtained. Hadron processes have been included as well as realistic wrapping of the crystals with Teflon and an aluminum cover.

BEAM DIAGNOSTICS STUDIES FOR HIE-ISOLDE

The Dr. Francesca Zocca, sponsored by the Consolider CPAN project, is working in beam diagnostics developments that are carried out on the framework of the R&D program for the HIE-ISOLDE superconducting (SC) upgrade of the REX-ISOLDE linear accelerator at CERN. In particular, a solid state detector monitor is being developed to be located downstream the cryogenic SC modules, for beam energy and timing measurements and for the SC cavities phase scanning. A silicon monitor prototype has been tested at REX with good results in terms of longitudinal beam profile and cavity phase-up measurements.

PHYSICAL BEHAVIOR AT NANO-SCALES

Probably molecular hydrogen (H_2) is the most obvious candidate to replace the fossil fuels as an energy vector environmentally neutral. A safe and efficient H_2 storage presents, however, a series of unsolved technological challenges. One possible solution is the adsorption of H_2 at low temperatures in light nanostructured materials. However, practical limitations impose a minimum temperature of 77 K (air liquid temperature) and a maximum pressure around 50 atmospheres. These are very challenging thermodynamical conditions. Above 33 K molecular hydrogen is in a supercritical state, that is, it is a fluid than cannot be condensed. In other words, the thermodynamic state is such that with weak interactions, i.e., that do not break the hydrogen molecule (physisorption), it is not possible to retain a substantial quantity of molecules on the adsorbent substrate. Since the retention of the molecules by means of chemical bonding (chemisorption) implies temperatures for the hydrogen release too high for the practical applications, it is compulsory to find microscopic mechanisms of molecular trapping going beyond those present in conventional sorbents.

By means of a concurrent use of neutron scattering techniques and adsorption measurement, we have been able to identify novel mechanisms that contribute to a substantial increase of the hydrogen storage capacity of the corresponding substrates. More specifically, we have observed a kinetic trapping process of the H_2 molecules in certain carbonaceous tubular bundles. During the filling process, the structure expands so that on one hand its nominal capacity increases as the pressure increases, while, on the other hand, the molecules get kinetically trapped in the structure so that an excess of particles are retained in the structure when the pressure is decreased, giving rise to a hysteresis loop in the adsorption/desorption process.

MICROSCOPIC STRUCTURE AND DYNAMICS OF DISORDERED CONDENSED MATTER

The wealth of microscopic structures of condensed matter goes far beyond traditional crystalline phases (ordered solid), glass (disordered solid) and liquid (fluid). Even simple molecular substances such as small chain monohydric alcohols (methanol, ethanol, propanol ...) have phases with different types of spatiotemporal order in different degrees of freedom. Probably, the most notable example is the ethanol in which apart from the conventional crystal, glass and liquid phases, can take a orientational glass phase with translational degrees of freedom arranged in a bcc crystal while the orientational ones are in a disordered glassy phase. These orientational degrees may in turn "fuse" at a certain temperature and rotate around the molecular centers of mass ordered in the crystalline structure. In this context, making recourse of the neutron diffraction techniques, we have studied the kinetic of the transition between the bcc rotator phase (plastic crystal) and the conventional monoclinic crystal as a function of temperature.

ADVANCED INSTRUMENTATION DEVELOPMENT FOR NEUTRON SOURCES

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

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

Apart from the center for accelerators, it is also under construction the instrument WISH (second target station of ISIS facility) in which we are involved in several of its components as well as the development of an update for PEARL (first target station ISIS facility) an instrument specialized in sample environments at extreme pressures.

2B.3 MOLECULAR PHYSICS DEPARTMENT

RESEARCH LINES:

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

RESEARCH SUBLINES:

- Molecular physics of atmospheric and astrophysical systems.
- Kinetics of cold plasmas and studies on plasma-surface interactions.
- Dynamics and kinetics of chemical reactions.
- Raman Spectroscopy in supersonic gas jets.
- Molecular clustering in gas jets.
- Rotational energy transfer coefficients by molecular collisions.
- Spectroscopic parameters of molecules of atmospheric relevance.
- Molecular Quantum Control.
- Molecular Alignment and Orientation.
- Ultracold Quantum gases.

EMPLOYED TECHNIQUES:

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

RESEARCH ACTIVITY:

MOLECULAR PHYSICS OF ATMOSPHERES AND PLASMAS

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

Molecular physics of atmospheric and astrophysical systems

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

We have completed a set of investigations on ices of methane and water, prompted by recent observations of CH_4 in different astrophysical objects. We prepared co-deposited samples of CH_4 and H_2O in a wide range of

stoichiometries and studied their temperature behaviour when they are warmed up to 60 K. The spectroscopic analysis is centered on the methane features, and also on the water dangling bond bands that appear in the spectra of the mixtures. The IR forbidden ν_1 band shows up in the spectrum (3.44 μm), indicating some form of distorted methane, probably adsorbed on water micro-pores or trapped inside the amorphous solid water structure. Raising the temperature of the ices up to 60 K liberates part of the methane, but a fraction is retained with a maximum value of $\sim 7 \pm 2$ %. This limit may provide information on the temperature properties of astrophysical objects. The different spectral characteristics of water dangling bonds in mixed samples can also furnish information to estimate the stoichiometry of the mixture.

We have continued our investigation on the ammonium/water ice mixture, in an attempt to shed more light on the assignment of the 6.85 μm band observed in the spectra of young stellar objects (YSO), sometimes attributed to the ν_4 bending mode of NH_4^+ . We have studied frozen solutions of NH_4Cl , NH_4COOH and NaCOOH in water in an astrophysical range of concentrations and temperatures, by hyper-quenching of liquid droplets on a cold substrate, and also by direct vapour deposition. The spectra of these species vary substantially with temperature and, in some cases, with deposition procedure. The astrophysical implications of these results are discussed in a paper published in *The Astrophysical Journal*.

In the atmospheric line of research, we have completed a theoretical investigation on ternary mixtures of hydrogen chloride, nitric acid and water, predicting the infrared and microwave spectra of up to 15 possible clusters that these compounds may form. The eventual presence of these species in the atmosphere can be detected by comparison with the predictions of this work. We also continue with the set-up of a new flow chamber dedicated to the production and study of atmospheric aerosols. The chamber is nearly ready and the first results are expected during 2011.

In addition to this line, we have performed a theoretical study on the catalytic mechanism of the liberation of iodine containing species to the atmosphere. Also in this investigation, we have explored iodination reactions of simple organic compounds that are commonly found in the marine troposphere.

The main results of this line are reflected in the corresponding publications as indicated later on in this Memory.

Kinetics of cold plasmas and studies on plasma-surfaces interactions

During 2010, several studies on cold plasmas have been carried out from a basic and a technical point of view. The basic research has been focused on the physical and chemical kinetics of low pressure ionized gases. The applied lines have been made in collaborations with the Plasma-Surface Interaction Group of the Fusion team of CIEMAT and with the Instituto de Sistemas Optoelectrónicos y Microtecnología (ISOM) of the Universidad Politécnica of Madrid.

Concerning basic research, we have initiated a study of H_2+D_2 plasmas at different pressures and relative compositions, which will allow us to clarify the relevance of wall recombination processes and gas phase reactions involving neutrals and ions. The analysis of the data is currently being performed by comparing our measurements with a theoretical model developed by us. These plasmas are of interest in fusion devices and in interstellar chemistry, as well as in technological processes involving the deposition by plasma of hydrogen containing films. Besides, we have finished a study of the kinetics of H_2+Ar cold plasmas where we have reached satisfactory agreement between our experimental data and model predictions. The main findings have been: a) the existence of small fractions of high energy electrons (>50 eV) accompanying the thermal electrons ($\sim 3\text{--}4$ eV) commonly found in these plasmas, which justify the appearance of unexpected high concentrations of Ar^{++} . b) The attenuation of the Ar^+ ions in the sheath through asymmetric charge exchange with H_2 , which produces ArH^+ . These plasmas find widespread application in diverse fields of material science, where they are employed for deposition and sputtering, or as particle sources, and the effects studied here may contribute to optimize the processing conditions.

In collaboration with CIEMAT, we have continued investigating the removal of hard amorphous hydrogenated carbon (a-C:H) films from narrow gaps, which simulates the macro-brush structures present in controlled fusion devices, of interest for ITER. For this purpose, we have deposited carbon hard coatings by means of $\text{He} + \text{CH}_4$ plasmas, and afterwards we have eroded the films by heating and oxidizing them in an oven up to 300 $^\circ\text{C}$, in NO_2+N_2 at controlled pressure.

In collaboration with ISOM, we have finished our study of the growth of silicon nitride (SiN) thin films on high electron mobility transistors (HEMT) by plasma enhanced chemical vapor deposition. It has allowed us to propose the best growing conditions for this technological process. On the other hand, the depth and composition of the samples deposited for our studies with CIEMAT has been analyzed in ISOM respectively, by profilometry, and by energy-dispersive X-ray spectroscopy (EDX) in a scanning electron microscope (SEM).

Dynamics and kinetics of chemical reactions and laser induced processes

A comparative study of various theoretical treatments of the dynamics of proton (or deuteron) exchange $D^+ + H_2$ and $H^+ + D_2$, isotopic variants of $H^+ + H_2$, which constitutes the simplest model in the field of ion molecule reactions. This work, motivated by our previous results using a cumulative reaction probability formalism, has shown, that in spite of the apparent simplicity of the problem, with just three protons and two electrons, there are significant discrepancies between the results of the quantum mechanical, classical and statistical treatments. At present, none of them can account satisfactorily for the reactivity of the system over the energy range (up to ~ 1.8 eV), where proton exchange is the only reactive channel. We are currently analyzing the strengths and weaknesses of the various theoretical methods and the reasons for the discrepancies. This work has been carried out within the framework of our “Unidad Asociada de Química Física Molecular”, which includes groups from the “Universidad Complutense” and the “Instituto de Química Física Rocasolano”. Laser induced processes have also been investigated in the context of this collaboration. The radicalic channel in the photo dissociation of acetaldehyde has been studied for wavelengths between 315 and 325 nm, using the velocity map imaging technique. The results have shown the existence of competing dissociation channels in the vicinity of the triplet exit barrier. Photo dissociation studies have also been performed on CH_3I and pyrrole molecules. In another work, the generation of low-order harmonics (third and fifth) of the fundamental radiation of a Q-switched Nd:YAG laser (1064 nm, pulse 15 ns) was observed in a CaF_2 laser ablation plume.

More details about this line of research and the researchers and supporting personnel that work in it, can be found in our webpage: <http://www.iem.cfmac.csic.es/departamentos/fismol/fmap/main.htm>.

MOLECULAR FLUID DYNAMICS

The main goal of this research line is the study of fluid flows in the interphase between the microscopic, essentially molecular and quantum, description, and the macroscopic one, governed by the continuous fluid mechanics. Although both limits are well developed as independent fields, their link is a sort of no-man's land lacking experimental data, sufficiently rigorous theoretical models, and efficient calculation methods.

From the experimental point of view, as demonstrated by the Laboratory of Molecular Fluid Dynamics, supersonic gas jets are a very fruitful research media, where the study of inelastic collisions, the fundamental mechanism of energy transfer between molecules, appearing in the core of the integer-differential generalized Boltzmann equation, can be afforded. On the other hand, during 2010 we started the study of under cooled liquid jets, which have proved an ideal medium for studying the homogeneous solidification, free from container wall effects or impurities.

Along the last sixteen years we have built at the Laboratory of Molecular Fluid Dynamics two complete instruments for jet diagnostics, whose performance and flexibility are unique worldwide. One of them (A) is devoted to the study of cohesive collisions and liquid jets, and the other one (B) to inelastic collisions. Major improvements have been carried out along 2010 on these instruments to suit the experiments. In this regard, a new system of glass capillary nozzle cooled by a liquid He cryostat, designed jointly with the University of Frankfurt, has been installed on instrument (A) to generate under cooled liquid microfilaments for their characterization by Raman spectroscopy. On the other hand, we had to implement several changes in the instrument (B) in order to produce gaseous jets of water, as well as their mixtures with H_2 and He, collisions that are the subject of current research projects. For this purpose we have mounted a new nozzle holder equipped with a heated container, as well as a cryogenic trap in the exhaust line prior to vacuum pumps.

Micro jets (filaments) of liquid para- H_2 , normal- H_2 , O_2 , and N_2 were generated on instrument (A), in a joint project with the University of Frankfurt. These filaments, 5 microns in diameter, are cooled by surface evaporation in vacuum, producing liquid samples highly under cooled below the melting point, until they break into droplets or solidify. Series of Raman spectra at different axial and transverse distances have been recorded on these filaments, monitored by laser shadowgraphy. Filaments of liquid para- H_2 , observed with a time resolution of ~ 10 ns, crystallize into a mixture of cubic and hexagonal phases, what has allowed to measure for the first time the crystal growth rate of ~ 30 cm/s. In turn, O_2 filaments solidify at much longer times, while those of N_2 brake up into droplets under the conditions of our experiments. The employed technique has revealed itself a very powerful tool to study such rapid phase changes.

On instrument (B) we have measured series of supersonic jets of pure oxygen from 90 and 280 micron nozzles at stagnation temperature $T_0 = 298$ K and pressure $p_0 = 100$ mbar, 230 mbar and 10 bar, in order to study the $O_2:O_2$ inelastic collisions in the temperature range below 50 K. We have also measured series of gaseous jets of pure water at stagnation temperatures from $T_0 = 320$ to 400 K and pressures from $p_0 = 100$ mbar to 1 bar, as well as mixtures with He, para- H_2 and normal- H_2 . The analysis of these measurements made clear that we need to improve

the accuracy in the determination of partial pressures to extract quantitative information on the inelastic collisions in these systems.

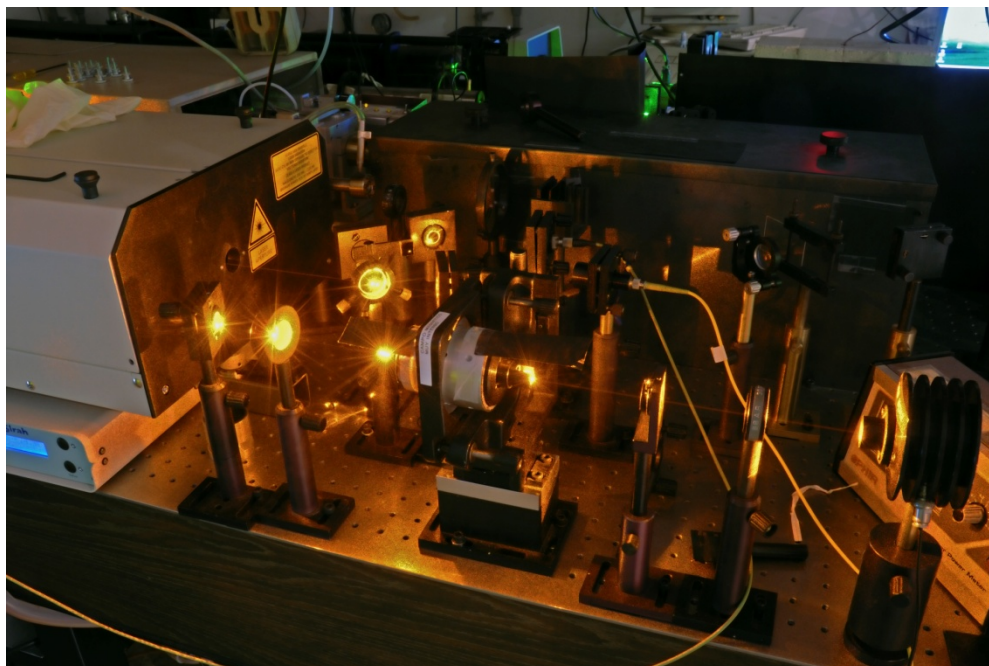
With regard to data interpretation, the first detailed analysis of the supersonic jets of pure O₂ has been completed in order to experimentally assess the *ab-initio* calculated cross sections and state-to-state rate coefficients for inelastic collisions in the O₂:O₂ system by the group of Theoretical Molecular Interactions and Dynamics of the Instituto de Física Fundamental, CSIC. The *ab-initio* calculated values turned out to agree well with the experiment in the temperature range from 10 to 34 K. It is expected to extend this collaboration between theoretical and experimental groups to other systems of astrophysical interest, such as CO and H₂O, what will improve our understanding of inelastic collisional processes in the very low temperature regime, allowing for the experimental validation of the intermolecular potential used in the calculations.

Finally, on the methodology section it is worth mentioning the development of a robust procedure to assess the calculated state-to-state rate coefficients for inelastic collisions and to estimate their confidence intervals, using a statistical approach by Monte Carlo simulation, as well as the writing of the corresponding FORTRAN program.

LASER SPECTROSCOPY

As a result of a three year effort, we have concluded the development of the double resonance Raman-Raman technique for the study of time-resolved state-to-state rotational energy transfer (RET) by collisions. RET studies are quite relevant in a number of fields: energy balance in astrophysical media, combustion diagnostics, laser dynamics, non local thermodynamic equilibrium scenarios, as well as in the origin of the formation of gas-phase spectral line shapes. The first results, the rate constant matrix for the C₂H₂-C₂H₂ system, have been published in the Journal of Chemical Physics. It is worth mentioning that in this work, with our experimental and data analysis approach, a rate constant matrix for all odd-J levels up to 17 has been determined without resorting to any fitting or scaling law, as it is frequently done. A broader goal of this line of work is to fill in the gap between the rotationally inelastic collision dynamics and the studies of collisional effects on lines shapes (mainly pressure broadening and line mixing). Rotationally inelastic collisions and elastic reorienting collisions are the main contributor to the pressure broadening of vibration-rotation spectral lines, and high resolution Raman spectroscopy continues to provide a wealth of information in this respect. Rotationally elastic collisions are not sensed by the trace of the polarizability operator, and therefore they do not contribute to the broadening of totally polarized transitions, thus enabling a more accurate link between pressure broadening experiments and collision modeling. Even with this important simplification it is usually necessary to make some more assumptions: vibrational dephasing and relaxation are negligible contributors to the broadening and the state-to-state rates are independent of the vibrational state. With the extension of our high resolution stimulated Raman technique to the time domain via this newly developed pump probe technique we have the tools to bridge the gap between the spectral domain (pressure broadening and line mixing) and the time domain (evolution of out of equilibrium populations.) In this respect we have measured the broadening of C₂H₂ (0100) by self-collisions both at 165 K and room temperature and we are currently analyzing this results, together with those of our previous RET analysis, together with members of the IFF(CSIC) (M. Bartolomei, M. Hernández and J. Campos). We have also recorded the high resolution spectrum of the ν_5 band of ethylene (C₂H₄). Ethylene is a tropospheric pollutant and has been identified in the atmospheres of Jupiter, Saturn, Neptune and Titan. The results are being analyzed by our colleagues at the Institute Carnot de Bourgogne (M. Rotger and V. Boudon.)

The infrared difference frequency laser spectrometer is being overhauled. It has recently been moved to an independent laboratory and we have taken the opportunity to improve some aspects of the setup: stabilization of the Ar⁺ laser, optical layout, data acquisition system and determination of the frequency scale of the infrared spectrum.



Stimulated Raman spectroscopy laboratory. Frequency stabilization of one of the tunable lasers.

THEORETICAL MOLECULAR PHYSICS

Molecular Quantum Control. Molecular alignment and orientation

We have studied the control of alignment and orientation of polar molecules in optical lattices, using a combination of static electric field and a pulse train of non-resonant laser pulses. Long range dipolar interaction strongly affects the macroscopic properties of a quantum gas and this field is very active now after the first experimental realizations. The control of the orientation of molecular dipoles provides a handle to control these macroscopic properties. The study of this complex system is an important development and mixes our previous studies on the control of orientation for isolated molecules with the ultra cold quantum gases line started last year in our group. Our goal is to adapt methods developed for isolated molecules to this new field. We have obtained some preliminary results on a toy model of a few molecules fixed in a tight-binding lattice.

For isolated molecules, we have carried on the study of high-energy cyclic states for which, under appropriate potential, the orientation oscillates with optimal amplitude at a frequency that is an integer multiple of the fundamental frequency of the pulse train. We have explored the creation of such states using adiabatic crossings of Floquet quasi-energies.

We have also analyzed the energy transfer in light-harvesting complexes (LHC) and the importance of quantum coherence and the back-action of the molecular environment on the energy flow. We have used an exciton model for the energy transfer and calculated the energy-transfer efficiency and the trapping time for the Fenna-Matthews-Olson complex taking into account the large reorganization energies and the couplings between the excitonic degrees of freedom and the molecular environments typically found in LHCs.

Ultracold Quantum gases

We have studied the momentum generation in a system of atoms at rest in an optical lattice, modulating the lattice with an unbiased time and spatially periodic laser field. The creation of these non-dissipative quantum ratchets is a very active field, as is the study of the dependence on the spatio-temporal symmetry. Generation of an asymptotic current at infinite time is only possible when both time and spatial symmetry of the system are broken. Our work shows that by using a tailored potential that does not break time-reversal symmetry it is still possible to maintain a relevant net average current in a time scale that can be fitted to the lifetime of actual experiments.

We have analyzed the possibility of using atom counting as a tool to distinguish strongly correlated phases of ultracold atoms. We have extended the theory of photon counting to atom counting both for bosons and fermions.

We have shown that the cumulants of the counting distribution reflect a quantum phase transition at zero temperature for strongly correlated fermions. We have shown that the effect is still visible at finite temperature. For ultracold bosonic systems we have shown that the counting distribution can be used to distinguish superfluid and insulating states, along with checkerboard and supersolid states. This work has been done in collaboration with the group of Prof. M. Lewenstein from the Institute of Photonic Sciences.

2B.4 VIBRATIONAL SPECTROSCOPY AND MULTIPHOTON PROCESSES DEPARTMENT

RESEARCH LINES:

- Chemical-Physics of Deposition and Ablation Processes
- Biospectroscopy
- Surface Spectroscopies
- Surface Plasmon Photonics and Metamaterials

RESEARCH SUBLINES:

- Ablation induced by IR Laser Radiation
- Laser Induced Breakdown Spectroscopy (LIBS)
- Surface-enhanced Spectroscopy (SERS, SEF, SEIRA) on metal nanostructures
- Vibrational Spectroscopy applied to Cultural Heritage
- SERS, SEF and SEIRA applied to pollutant and doping drug detection
- Applications of SERS to biology: drug/biomolecule interaction
- Plasmon resonances on metal nanostructures (Nanoantennae): Raman and Fluorescence
- Metamaterials in the optical range

EMPLOYED TECHNIQUES:

- IR Spectroscopy (Normal, FTIR, and SEIR)
- Raman Spectroscopy (normal, micro-Raman, Raman mapping, Raman imaging and SERS)
- Visible-UV Spectroscopy
- IR and Raman Spectroscopy of twodimensional correlation by H/D isotopic exchange
- Optical Emission Spectroscopy (OES)
- Fluorescence Spectroscopy
- Transmission and Scanning Electron Microscopy (TEM, SEM)
- Multivariate statistical analysis
- Theoretical Physics (Classical Electrodynamics) and Numerical Calculations

RESEARCH ACTIVITY:

Laser Induced Breakdown Spectroscopy (LIBS). We have studied the formation of plasmas by Laser Induced Breakdown in different gaseous atmospheres by using high resolution Optical Emission Spectroscopy. A spectroscopic study of ambient air plasma, initially at room temperature and pressures ranging from 32 to 101 kPa, has been carried out in an attempt to clarify the processes involved in laser-induced breakdown (LIB) air plasma. The strong emission observed in the plasma region is mainly due to electronic relaxation of excited N, O and ionic fragments N⁺. The medium-weak emission is due to excited species O⁺, N²⁺, O²⁺, C, C⁺, C²⁺, H, Ar and molecular band systems of N²⁺(B²Σ⁺-X²Σ⁺g⁺), N²(C³Π^u-B³Π^g), N²⁺(D²Π^g-A²Π^u) and OH(A²Σ⁺-X²Π). Excitation temperatures of 23400 ± 700 K and 26600 ± 1400 K were estimated by means of ionic lines, respectively. The estimated effective vibrational and rotational temperatures are 12000 ± 900 K and 1900 ± 100 K, respectively. Electron number densities of the order of (1-8)×10¹⁷ cm⁻³ were obtained from the Stark broadening of several ionic N⁺ and O⁺ lines. Optical breakdown threshold intensities in air at different pressures have been measured. We propose that electron impact is the main mechanism responsible for the breakdown in air.

The characteristics of the spectral emission intensities from different species have been investigated as functions of the air pressure and laser irradiance. Also, we have studied with time resolution the optical emissions for different species. The velocity and kinetic energy distributions for the different species were obtained from time-of-flight measurements. Temporal evolution of electron density in the plasma has been used for the estimation of the three-body recombination rate constant.

LIB in germane (GeH₄) has been investigated for first time. The emissions observed in the germane plasma (2 to 10 kPa) are mainly due to electronic relaxation of excited Ge, H, H₂ and ionic fragments Ge⁺, Ge²⁺ and Ge³⁺. Excitation temperatures for Ge (8100K) and Ge⁺ (23500K) were estimated. Electron number densities of the order of $(0.7\text{--}6.2) \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ were obtained from the Stark broadening of several atomic Ge lines. The characteristics of the spectral emission intensities from different species have been investigated as function on the GeH₄ pressure and laser irradiance. Optical breakdown threshold intensities in germane have been measured. Although the first electrons must appear via MPI (multiphoton ionization) of any molecular species present in the laser focal volume, or by natural ionization, electron impact ionization is the main mechanism responsible for breakdown in GeH₄.

Infrared laser induced ablation plasmas. We have studied the IR laser-induced irradiation of Co and Ni sheets. When ablation is carried out in gaseous benzene leads to dielectric breakdown, resulting in H atoms, neutral and ionic carbon and C₂ species and ethyne and butadiyne. The presence of gas (benzene) also inhibits metal plasma and leads deposition of nanostructured carbon. Different features of carbon deposited on a substrat glass and on the irradiated metal sheets were revealed by FTIR, Auger and Raman spectroscopy and electron microscopy. The carbon films deposited on the irradiated metal sheets resemble ordered graphite and fullerene units and have more ordered sp² phase than the films deposited on a substrate glass. The reported results suggests a novel approach to gas-phase carbonization of organic molecules.

Infrared and Raman biospectroscopy. Within this research line, we have measured infrared spectra of blood fractions from 89 individuals, 65 of them being Alzheimer disease patients and 24 controls. Particularly we have measured infrared spectra of whole peripheral blood, three plasma fractions having various platelet contents, erythrocytes, lymphocytes, serum and white cells. Mathematical treatments of spectra are being carried out for normalization, baseline correction and subsequent multivariate statistical analysis (principal component analysis, PLS and cluster analysis) in order to distinguish between spectra from patients and controls. Additionally, one of the molecular characteristics of this condition is deposit of amyloid peptides in brain tissue, these adopting a conformational β -sheet structure. Accordingly we have tried to know whether or not this deposit is accompanied by amyloid increasing concentration in blood, particularly in lymphocyte fractions. Taking together all the cases studied so far, we have found 85% sensitivity and 91% specificity in the quantitative determination of β -sheet polypeptide structure as biodiagnosis tool for this disease.

Structure of biological systems in food. In collaboration with Instituto de Ciencia y Tecnología de Alimentos y Nutrición (ICTAN, CSIC), we have measured infrared and Raman spectra of lipids extracted from hake muscle, either in fresh or frozen stored state. The spectral changes occurring during frozen storage periods are indicative mainly of hydrolysis phenomena. Infrared analysis reveals also that the corresponding lipases act preferably through the two phospholipid ester groups. The said spectral changes will be used as a basis for subsequent multivariate statistical analysis aimed at determining alimentary quality.

Preparation of metal nanoparticles. The preparation of nanoparticles (NPs) supporting plasmonic properties of metal has been a priority line of the group during this period. We have devoted special attention to the NPs with morphologies that lead to high electromagnetic field enhancements as nanorods and triangular nanoprisms. To accomplish this it has been established experimental conditions that lead up to this kind of morphologies.

In this line we have proceeded to the manufacture of mixed metal systems core/shell, which combines the plasmonic properties of both metals, preserving the characteristics of the metal surface to the outer layer. For instance we have successfully manufactured Au/Ag and Au/Pt systems by reduction of Ag and Pt on Au nanoparticles, respectively. These systems were characterized by plasmon resonance, microscopy (TEM, SEM and AFM), and SERS. The use of molecular markers or sensor systems, which are adsorbed through a different mechanism on the different metal outer layer, has yielded valuable information about the distribution of metals in the resulting particles and determine their effectiveness in SERS .

Within this line, too, we have carried out the nanofabrication of core/shell systems consisting in magnetic nanoparticles coated with Ag and Au, thus resulting systems where the metal plasmonic properties used to cover (shell) are combined with the magnetite magnetic properties of the core. These systems have been characterized by spectroscopic techniques like UV-visible absorption, IR and Raman microscopy, TEM, X-ray diffraction and magnetization measurements.

Finally, we have continued with the assembly of plasmonic metal NPs using bifunctional molecules that lead to the formation of highly effective interparticle cavities or hot spots, where the Raman scattering is markedly enhanced. To carry out this task bifunctional molecules as diamines, dithiols and aliphatic dicarboxylates have been used.

Surface functionalization: nanosensors. As in previous years, an important part of the work done in our group during 2010 was devoted to the functionalization of metal surfaces obtained by self-assembly of organic molecules. The functionalization can significantly increase the sensitivity and selectivity of the nanostructures formed, thus obtaining the high-performance surfaces by combining the physical properties of the metal substrate with the chemical properties of organic molecules self-assembled on them.

Functionalization with host or receptor molecules such as calixarenes and cyclodextrins has been possible thanks to the inclusion in these groups of chemical groups displaying a high affinity for metal surfaces such as the group dithiocarbamate (DTC). The DTC group has a high affinity for Au and Ag, which has enhanced the efficiency of the functionalization, resulting in metal systems/assemblies with high performance in detecting contaminants, for illicit doping drugs used in sport. The detection of these analytes is possible by the existence of hydrophobic cavities in these hosts, in which the molecules to be detected can be accommodated.

Another group of molecules previously used in the functionalization of metal surfaces, the viologens, whose activity is related to their host properties as electron acceptor, were used in the detection of contaminants such as polycyclic aromatic hydrocarbons, which act as electron donors. The viologen interacts strongly with the metal through ion-pair or charge transfer complexes between viologen and previously attached to the metal halide. The bifunctional viologen dramatically improves the performance of these substances to act as creators of interparticle spaces with high electromagnetic field enhancement (hot spots).

Finally we have studied the functionalization molecules using bifunctional diamines, dithiols and aliphatic dicarboxylate which could induce the formation of hot spots, thanks to the creation of NP-NP dimers. The identification of the plasmon resonance band of the dimers formed allowed finding a correlation with the length of the aliphatic chain. Interparticle distance and the wavelength of maximum absorption of the longitudinal plasmon NP-NP dimer were also investigated in this research. These molecular assemblers have allowed the detection of non-aromatic pollutants that could not be analyzed with calixarenes and viologen.

Interaction between metal nanoparticles and biomolecules. Also with the scope of the functionalization of nanostructured metal surfaces, we have continued the line of research consists in the design of metal-biomolecule hybrid systems for the manufacture of high performance systems with nanotechnology interest. In particular, the adsorption on metal NP of oligopeptides to fabricate nanobiomaterials that can function as drug deliverer or biosensors. During this year we conducted a study of the adsorption of peptides of specific sequence and characteristics of different polarity and hydrophobicity to assess affinity for metal surfaces. In order to increase the affinity of peptides and proteins by metal surfaces used in SERS, we have proceeded to the functionalization of these compounds by polysaccharides of high affinity for metals such as chitosan and alginate. This method has enhanced the biocompatibility of the metal NPs which are commonly used in SERS, allowing for increased affinity of biomolecules for metal. For example, this method has been developed to study the interaction of collagen with metal surfaces it has already given positive results.

Another type of biomolecules whose adsorption on metal NPs has been studied for this year were melanins produced by the digestion processes by fungi and humic substances of different structures. In this line we have carried out a study of the adsorption of humic substances of different origin (soil, leonardite, lignite) on metal electrodes in order to study the effect of applied potential on the SERS and SEF spectra of these substances.

Surface-enhanced fluorescence on metal surfaces (SEF). During this past year we have continued with the technical implementation of the SEF (Surface-enhanced Fluorescence) on NPs in colloidal suspension. This method has allowed the study of adsorption and aggregation of drugs, especially antitumor drug emodin, and anti-inflammatory drug piroxicam on metal nanoparticles. It has also been found that the functionalization of metal nanoparticles SEF is crucial, since the intensification of fluorescence requires a certain distance of the fluorophore on the metal. The interaction of these drugs with albumin results in a consequent increase in the SEF spectra, along with the SERS spectra, circular dichroism spectra and fluorescence lifetime have led to important results on the structural changes undergone by these systems once adsorbed on the metal surface.

Nanosensors based on sers for detection of drugs used in sport doping. We have made significant progress in the research involving the application of SERS technique for detection and characterization of drugs used in sport doping (DSD). This research was the basis of the PhD work of Irene Izquierdo. During 2010 it was published the first SERS spectra obtained for these substances at low concentrations. This work dealt with the study of a series of β -agonists: clenbuterol, salbutamol and terbutaline, as well as aminoglutethimide, an aromatase inhibitor used in

athletes to prevent loss of muscle mass. The use of Ag NPs in the shape of triangular prisms lowered the limit of detection of these compounds to levels not detected before by conventional techniques. Furthermore, the detection by SERS of DSD occurs in a selective way, as the SERS spectra are genuine fingerprint of the compound. This study was also completed with a theoretical study of the vibrational modes and a study of the adsorption isotherms of drugs investigated on metal NPs. Finally, it was possible the detection of nandrolone, another DSD with an anabolic character, which cannot be detected directly on NPs, thanks to the surface functionalization with cyclodextrins attached to DTC.

Laser techniques applied to the study and conservation and restoration of works of art and monuments.

During this year we have published the results of applying the method of induction of Ag NPs by photoreduction in-situ for the study and detection of organic pigments in natural fibers without extraction. Specifically, the published results have involved the analysis of natural anthraquinone red pigments such as alizarin. The results obtained by SERS were compared with those obtained by conventional chromatographic techniques, which allowed the study of the location of these pigments in the above materials without the need for extraction methods.

Within this line of research we have made significant progress in implementing SEF and SERS spectroscopy to the study of synthetic organic pigments, in charge of the PhD student Elena del Puerto. The pigments studied in this field were mainly those derived from quinacridone, known for their high durability, in part due to its high insolubility in aqueous media, making it difficult their characterization by conventional spectroscopic techniques. The SERS study was possible thanks to the surface functionalization with calixarenes of different sizes (4 and 8 benzene rings), finding a correlation between the cavity of the host molecule and the pigment. The adsorption of these molecules by Langmuir-Blodgett films has also allowed its characterization and a study of the variation in the emission SERS and SEF as a function of the distance of the pigment with respect to the surface. During this year we have extended this research to two new derivatives of quinacridone pigments of interest in the development of OLED (Organic Light Emission Diodes), particularly the dimethylquinacridone and dichloroquinacridone, which have been characterized by the corresponding SERS and SEF spectra.

Raman spectroscopy and SERS technique has also been applied in the study of pigments contained in Morocco's ancient Islamic manuscripts. In this sense the application of SERS technique has been useful in identifying red and yellow pigments of an organic nature, which can not be characterized by conventional techniques due to the high fluorescence of these dyes.

Finally, in relation to the researching line dealing with the study of the Cultural Heritage, during 2010 we have continued with the application of Raman spectroscopy to characterize building materials. Within this field we have begun to develop a new line of research on the analysis of admixtures integrated by molecular organic added to mortar and concrete, which are added to improve their rheological properties. We are currently studying three types of admixtures: a) melamine sulfonates (traditional), b) lignosulfonates (natural products) and c) polycarboxylates (last generation). The additives studied have a complex structure since they tend to be admixtures of various compounds. We have obtained the Raman spectra of these compounds and we are working on obtaining the SERS spectra of them. An analysis of the vibrational modes was carried out in order to elucidate the structure and monitoring structural changes found by varying parameters such as pH (fundamental in the aqueous phase in concrete) or the interaction with the cement components. In general additive molecules have an apolar and polar part, being the latter one that directly involved in the interaction with the cement components.

The acquisition of a InVia Reflex Renishaw Raman Spectrometer with excitations at 442, 325, 532 and 785 nm and Spectroscopic Imaging System StreamLine through the EQUIPA program of the IEM for the year 2010. This can be considered as a CSIC fund in recognition for the work research developed in our group in relation to the investigation of the spectroscopy on metal surfaces and plasmon photonics.

Localized plasmon resonances on metal nanostructures: Raman and fluorescence. Within the activities corresponding to the project NANOPLAS (Plasmon Optical Nanantennas), we have investigated theoretically the optical properties associated to localized plasmon resonances (LPR) of metal nanowires with cross section given by low-order Chebyshev nanoparticles (like rounded-tip nanostars or nanoflowers). The impact of the nanoflower shape is analyzed for varying symmetry and deformation parameter through the spectral dependence of resonances and their corresponding near field distributions. Large field intensity enhancements are obtained at the gaps between petals, apart from the tips themselves, which make these nanostars/nanoflowers specially suitable to host molecules for surface-enhanced Raman scattering sensing applications.

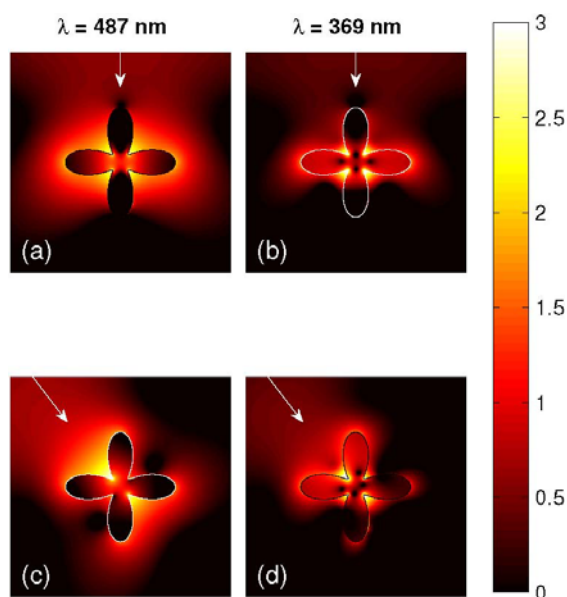


Figure: Near-field distributions of the electric field intensities in a $\log_{10}$ -scale for the Ag four-petal nanoflower with mean radius $\rho=30$ nm and deformation parameter $\beta=2/3$, illuminated with a monochromatic plane wave with wavelength equal to either one of the two main LPRs (dipolar and quadrupolar, respectively) at $\lambda=487$ nm (a,c) and at $\lambda=369$ nm (b,d): (a,b) $\theta_i=0^\circ$; (c,d) $\theta_i=45^\circ$. Cover of the journal *Plasmonics* (Vol. 5, 2010).

On the other hand, we have found an analogue to optical metal nanoantennas in the terahertz (THz) domain. Essentially, it consists of elongated microstructures (same shape but 10^3 times larger) made of semiconductors, which in turn behave themselves in that regime of the electromagnetic spectrum (THz) as metals in the visible. This has been carried out in collaboration with the groups of Dr. Jaime Gómez Rivas (FOM-Institute AMOLF and Philips Research Labs, Eindhoven), and of Dr. Stefan Maier (Imperial College, London).

Metamaterials in the optical range. Within the activities corresponding to the CONSOLIDER-INGENIO project *EMET* (Engineering METamaterials), we have investigated the optical properties of media with negative magnetic response ($\mu < 0$). Such media do not exist in nature, but can be obtained from artificial metamaterials. In this regard, we have extended the scattering formalism of the Green's theorem to include a discontinuity in the magnetic permeability μ (isotropic and homogeneous). For this purpose we have made use of the continuity or saltus conditions for the EM field across the interface between media having different ϵ and μ . Numerical analysis has been performed for linearly polarized light and randomly rough media with negative μ , with special emphasis on the phenomenon of enhanced backscattering. In collaboration with the group of Profs. Fernando Moreno and Francisco González (Dpto. de Física Aplicada, Universidad de Cantabria).

2B.5 MACROMOLECULAR PHYSICS DEPARTMENT

RESEARCH LINES:

- Simulation of polymer reactions and of physical properties of polymers.
- Physical properties and nanostructure of polymers.
- Polymer Physics: Order and mobility in macromolecular systems.
- Application of the synchrotron light to the study of polymers and nanostructured materials.
- Interfaces.

RESEARCH SUBLINES:

- Nanostructure of polymer thin films.
- Polymer nanocomposites: Structure and physical properties.
- Confined structure and dynamics in Soft Matter.
- Structure of colloids and lipoplexes
- 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 polyolefin blends.

- Molecular dynamics and dielectric properties.
- Structure-dynamics -relationships in soft and polymeric condensed matter.
- Transmission electron microscopy: Structural triodimensional study of biological macromolecules.
- Biophysics.

TECHNIQUES:

- o Scattering and diffraction of X-rays at Wide (WAXS), Small (SAXS), and Ultra-Small (USAXS) Angles and with grazing incidente (GISAXS) including micro- and nano-beam with synchrotron radiation.
- o Scanning Diferential Calorimetry.
- o Incoherent quasielastic neutron scattering.
- o Optical microscopy. Scanning electronic microscopy.
- o Raman Spectroscopy.
- o Micro and nano hardness.
- o Neutron Scattering.
- o Broad band dielectric spectroscopy.
- o Shear rheometry in continuous dynamic torsion.
- o Capilar extrusion and elongational rheometry.
- o Dynamic mechanical analysis under flexural deformation.
- o Dynamic mechanical analysis under tensile deformation: elastic modulus.
- o Analysis by crystallization temperature fractionation (CRYSTAF).
- o Scanning/transmission electron (STEM) and atomic force (AFM) microscopies.
- o Size exclusion chromatography (SEC) and multi angle laser light scattering (MALLS) at high temperatures.
- o Dynamic light scattering (DLS).

RESEARCH ACTIVITY:

STUDY OF THE NANOSTRUCTURE AND THE THERMAL STABILITY OF MULTILAYERED AMORPHOUS POLYMER FILMS

The nanolayered structure of a forced-assembly of two immiscible amorphous polymers, prepared by layer-multiplying coextrusion, has been analyzed for the first time by means of USAXS. The experimental long spacings for the series of PMMA/PS films studied show a good correlation with the nominal periodicity values of the stacks. In addition, the long spacings, derived from a localized area in AFM, are also in good agreement with the USAXS values averaged over much larger areas. The structural variation, after thermal treatment, of two samples with nominal periodicities of around 200nm has been reported. In the range RT-140°C, the nanolayered structure is mostly well preserved as evidenced by AFM. However, the absence of USAXS maxima after annealing at temperatures included in the above range has been tentatively explained by interfacial coarsening and spinodal dewetting occurring between the forced-assembled polymer layers. Above 140°C, the interfacially driven break-up of the layers ends up with the final disappearance of the multilayered structure.

FINITE SIZE EFFECTS IN MULTILAYERED POLYMER SYSTEMS: DEVELOPMENT OF CRYSTALLINE LAMELLAE UNDER PHYSICAL CONFINEMENT

The glass transition temperature and the crystallization behaviour of poly(ethylene terephthalate) PET ultra-thin layers (a few tens of nm) within multilayered PET/polycarbonate (PC) coextruded films have been investigated as a function of layer thickness by means of calorimetric measurements. Results have been discussed in terms of reduced thickness and interface effects. The appearance and evolution of lamellar orientation upon isothermal crystallization of ultra-thin PET layers from the glassy state have been explored based on real time small-angle X-ray scattering (SAXS) studies. Analysis of the SAXS measurements has revealed that finite size effects hamper the crystallization process. However, the final lamellar structure is similar in both, the nanolayered PET and the bulk material. Results suggest that not only lamellar insertion but also some lamellar thickening contribute to the development of the final lamellar structure. Room temperature SAXS and wide-angle X-ray diffraction (WAXS) measurements indicate that two lamellar populations develop: edge-on lamellae are proposed to appear close to the interphases while flat-on lamellae should be preferentially located in the layers core.

MICROINDENTATION HARDNESS OF NANOSTRUCTURED THERMOPLASTIC MATERIALS

The micromechanical behaviour of various thermoplastics based nanocomposites has been investigated with the aid of the microindentation technique. The materials studied were microphase separated styrene-butadiene block

copolymer systems and several thermoplastics reinforced with nano-sized fillers having variable dimensionality. It has been found that the microhardness behaviour of the nanocomposites studied is strongly influenced by the dimensionalities of the filler. Due to large surface to volume-ratio one- and two-dimensional fillers exhibit a far better reinforcing behaviour than the three dimensional ones. In case of nanostructured block copolymers, the microhardness is not determined by the total polystyrene (PS)/polybutadiene (PB) composition alone but diminishes gradually in presence of freely standing dangling polybutadiene chains even if the morphology of the systems remains unaltered.

NANOSTRUCTURE AND MORPHOLOGY OF NYLON/GRAPHENE NANOFIBRES

The morphology and nanostructure of a series of nylon/graphene membranes produced by electrospinning were investigated as a function of graphene content. X-ray diffraction studies revealed that the pure nylon 66 nanofibres exhibited reduced degree of crystallinity levels, smaller lateral crystal sizes and thinner crystals than the analogous material prepared by compression moulding. The degree of graphene incorporation within the nanofibres was investigated using electron microscopy. X-ray diffraction studies revealed that the addition of graphene induced significant changes in the crystalline structure of the polyamide. Indeed, the distance between the (100) planes of the triclinic unit cell of nylon 66, associated to the strength of the hydrogen bonds between adjacent molecules, was found to gradually increase as a function of graphene content.

STRUCTURE AND MICROMECHANICAL PROPERTIES IN BLENDS OF RECYCLED POLY(ETHYLENE TEREPHTHALATE) WITH POLYOLEFINS. EFFECT OF THE COMPATIBILIZER SEBS-MAH

We have investigated binary blends of recycled poly(ethylene terephthalate) PET with isotactic poly(propylene) iPP and with high density poly(ethylene) HDPE, prepared in the University of Sétif (Algeria). Both types of blends are incompatible. However, the addition to these blends of SEBS-MAH (block copolymer styrene-ethylene/butylene-styrene grafted with maleic anhydride) in different amounts gives rise to their compatibilization. This is demonstrated through the study of the blends carried out by means of wide-angle X-ray scattering (WAXS), differential scanning calorimetry (DSC) and microhardness measurements. Moreover, the effect of the addition of different amounts of clay to these blends has been described. In case of the compatibilized PET/iPP blends, the clay seems to have a nucleating effect on the iPP component, these blends increasing their crystallinity and microhardness. On the contrary, the crystallinity in all the PET/HDPE blends (pure, with compatibilizer, or with compatibilizer plus clay) depends only on their composition.

MICROMECHANICAL PROPERTIES-NANOSTRUCTURE RELATIONSHIP IN BIODEGRADABLE ALIPHATIC POLYESTERS

The biodegradable aliphatic polyesters have been synthesized by Prof. Kricheldorf and co-workers (University of Hamburg, Germany). The samples have been characterized by wide- and small-angle X-ray scattering (WAXS and SAXS), DSC and microhardness measurements. The values obtained for the crystallinity degree and the crystal thickness of the polyesters have been correlated with their microhardness. The different thermal and mechanical properties exhibited by these polyesters compared to the aromatic ones are explained by the different chemical natures of the monomeric units.

STUDY OF COMPOSITES BASED ON ISOTACTIC POLYPROPYLENE iPP WITH CLAY OR TITANIUM DIOXIDE, TiO₂

These composites have been prepared in the University of Dhaka (Bangladesh). Their study has been carried out by several techniques: WAXS, SAXS, DSC and microhardness measurements. The results obtained indicated that the microstructure and the mechanical properties of the pristine iPP, as well as those of the composites, are affected by the processing temperature of the material and by the cooling rate from the molten state. In case of slowly cooled composites, the presence of increasing amounts of additive provokes a decrease of, both, the iPP crystallinity and the microhardness of the material. This effect is notably higher for the clay- containing samples. In the quenched composites prepared with clay, the iPP crystallinity increases when the clay content increases. However, the iPP/TiO₂ samples show the opposite behavior. The microhardness in the quenched composites increases with the additive amount, no matter which the additive is.

SOME INTERESTING ASPECTS OF THE REVERSIBLE CROSSLINKING OF THE ISOTACTIC POLYPROPYLENE

This is an extension of our previous line of research. Isotactic polypropylene iPP has been reversibly crosslinked according to the method developed by Dr. Bouhelal (University of Sétif, Algeria). In collaboration with other

groups of research, we have performed 4 parallel studies on the reversible crosslinked isotactic polypropylene, which we will call XiPP: Influence of 1) the content of the crosslinking agent and 2) the repeated crosslinking process in the microstructure of the XiPP; 3) possibility of using these compositions as “master batches” to improve the properties of the iPP, even of the degraded one; and 4) effect of the number of extrusion cycles on the XiPP properties. The techniques used to characterize the samples have been: WAXS, DSC, dynamic mechanical thermal analysis (DMTA), ^{13}C nuclear magnetic resonance (^{13}C NMR), Fourier-transform infrared spectroscopy (FTIR) and melt flow index (MFI) measurements. The results obtained demonstrate that the microstructure of iPP does not experience important changes neither by the addition of crosslinking agents in different amounts, nor after being subjected to repeated crosslinking processes, what supposes a higher number of extrusion cycles. Moreover, it is evidenced the possibility of using an XiPP with a fixed crosslinking degree as a “master batch”, that can be added to the unmodified iPP in different proportions.

NANOSTRUCTURING POLYMERS IN 3D

Through nanoparticles. We have used carbon nanotubes as templates to control the intrinsic nanostructure of semicrystalline polymers with the aim of improving the physical properties of the nanocomposite. Precisely, by in-situ polymerisation, nanocomposites of Poly (ethylene terephthalate) (PET) and carbon nanotubes single wall (SWCNT) as an additive were prepared. It is found that the undulations of the structure of the nanotubes have an influence on the mechanical properties, in addition a certain degree of SWCNT aggregation improve optical properties and increase the electrical conductivity. Also, in this line, we have investigated the segmental dynamics of natural and vulcanized rubber in a series of nanocomposites with nanoclay. The results show that neither the concentration nor the type of clay changes the segmental dynamics, related to the viscosity of the system. By contrast the dynamics of the chain, connected to the flow, is slowed by the presence of nanoclay. We attributed this effect to the presence of natural rubber chains at the interface rubber / clay. Within this framework, in collaboration with the group of polymers and micro-fluidics of the department of Chemical Engineering of the Imperial College London (London, United Kingdom) we have studied dynamic properties of a family of nanocomposites consisting of poly(styrene) and C60 nanoparticles. The main experimental tools to tackle this challenge were based on neutron scattering at different space-time scales, calorimetry and dielectric spectroscopy, in order to investigate structural and dynamic aspects of polymer nanocomposites. We find that the fullerene nanoparticles increase the glass transition temperature, slowing down the a relaxation dynamics associated with glass formation, while at the same time cause a softening of the material at high frequencies (as determined by the Debye–Waller factor). These effects are interpreted in terms of the particle modifying the polymer packing, causing an increase of the fragility of glass formation. Our measurements, in combination with previous work, demonstrate that the fragility of glass formation can be tuned through the judicious choice of nanoparticles, an effect which has numerous implications for the mechanical properties, permeability and other basic properties of polymer nanocomposites. Also, by ultra low angles X-ray scattering (USAXS), we have studied the influence that the particle type, has on the rheology of a polymer matrix. In this case the nanoparticles are iron oxides and interpenetrating polymer networks matrices of poly (N-isopropylacrylamide) (PNiPAAm). The combination of USAXS and rheology has allowed to identify when the iron oxide particles are bonded to the polymer matrix and when they are just embedded in it.

Semicrystalline polymers. In the frame of studies aimed at elucidating the interrelation between the intrinsic nanostructure of semicrystalline and polymer segmental dynamics we have investigated by simultaneous X-ray scattering and dielectric spectroscopy, crystallization of the Poly (trimethylene terephthalate) (PTT). The simultaneity of the two measures allow us to elucidate the effect that crystal formation has on the molecular dynamics of the remaining amorphous phase. This dynamic is responsible for the mechanical properties at room temperature of most semi-crystalline polymers. PTT is an aromatic polyester with better physical and processing properties in comparison with PET, commonly used in industry today. Our experiments show that the structural homogeneity, reflected in the distribution of crystalline phase embedded in the amorphous phase is better than in PET.

Self-assembly in diblock copolymers. The phase diagrams of block copolymers have been studied by X-ray scattering at low angle (SAXS) and differential scanning calorimetry (DSC). By SAXS measurements we have determined the temperatures of order-disorder transition and the morphologies adopted by these systems after the segregation of phases. To measure with sufficient temporal resolution and temperature, Small Angle X rays scattering measurements were carried out in the Spanish line BM16 at the European Synchrotron ESRF. We have studied systems in the weak segregation limit, as the diblock copolymer composed of poly (styrene) and poly (ethyl methacrylate), and in the strong segregation limit formed by poly (styrene) and poly (dimethyl siloxane). The PS-b-PEMA self-assembles by heating resulting in a layered structure in which the thickness of the domains can be adjusted controlled by heat treatments at different temperatures and times. Once the structure is characterized, the dynamics of chains of poly (ethyl methacrylate) has been explored selectively using broadband dielectric spectroscopy, showing a slowing of the segmental dynamics and changes in apparent activation energy of the α relaxation compared with that of the homopolymer poly (ethyl methacrylate). The study of diblock copolymers of PS-PDMS has been done in collaboration with the group of Prof. Enrique Vallés (National

University in South Argentina), The results reveal that the samples with high content of PDMS present a lamellar morphology while others have a hexagonal phase PDMS cylinder embedded in a PS matrix.

2D NANOSTRUCTURING POLYMERS

A systematic study of the nanostructure and development of it in semi-crystalline polymers nanofilms prepared by spin-coating method has been started. The polymers investigated were a family of biodegradable and biocompatible aliphatic polyesters based on propylendiol and a variable number of CH₂ groups in the monomer such as propylene succinate (PPS), polypropylene glutarate (PPG), polypropylene adipate (PPA) and polypropylene azelate (PPAZ). The morphology was investigated by atomic force microscopy (AFM) and grazing incidence X-ray scattering at low (GISAXS) and high angles (GIWAXS). AFM experiments show the existence of a spherulitic structure that provides stability to the film to a thickness of 15 nm. For smaller thicknesses the films are unstable and dewet. The experiments of X-ray scattering revealed that in all investigated polymers except PPAZ, crystals are arranged with the axis parallel to the substrate polymer, resulting in a morphology of type "edge-on." In PPAZ the situation is reversed and the morphology is a "flat-on." The repulsive effect of the aliphatic segment compared to the silicon substrate is responsible for this change of morphology.

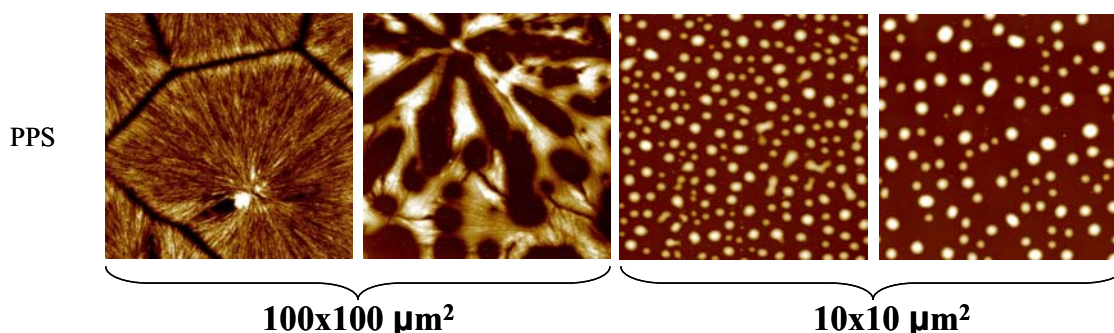


Image showing the transition from spherulitic morphology to polymeric nanodroplets in nanofilms of poly(propylene succinate) (PPS) for different thicknesses decreasing from left to right.

1D NANOSTRUCTURING POLYMERS

Inorganic templates have been prepared in order to confine polymer nanostructures inside. Because of the importance of the confining media, the inorganic template used to confine and therefore produce polymeric nanotubes or nanorods, we have undertaken the characterization by GISAXS of a series of titanium oxide membranes prepared by physical deposition vapor phase and oblique incidence (GAPVD). The membranes consist of inclined columns with porosities in the range of nanometers. It was the first time GISAXS has been used for morphological characterization of such membranes.

Nanotubes and nanorods of polyvinylidene fluoride (PVDF) obtained by infiltration of polymer solutions in porous membranes aluminum oxide with cylindrical nanopores has been characterized. In this case we have demonstrated that wetting of the walls of alumina by the polymer solution produce, after solvent evaporation, the formation of nanorods of PVDF with a ferroelectric crystalline structure supported by a non-ferroelectric PVDF. The system was investigated using X-ray diffraction with microfocus and synchrotron light line ID13 of European Synchrotron Radiation Facility (ESRF) in Grenoble, France. The results indicate that the interaction polymer / alumina type imposes a "flat-on" morphology.

CHARACTERIZATION OF COLLOIDS OF INTEREST BIOLOGICAL AND LIPOPLEXES

In collaboration with the Department of Physical Chemistry at the UCM a systematic study on the structure of liposomes composed of a cationic lipid (DC-Chol) and zwitterionic one (DOPE) in the presence of DNA was conducted. Using X-ray scattering at low angle the effect of lipid composition on the structure of these lipoplex has been established and compared with the theoretical phase diagram, with a very satisfactory agreement.

INVESTIGATION OF ELECTRICAL CONDUCTIVITY IN POLYMER COMPOSITES WITH CARBON NANOFIBERS OPTIMALLY DISPERSED

Carbon nanofibers (GANF, supplied by Grupo Antolín Ingeniería SA) have been functionalized with three reagents, namely, ammonia, ozone and nitric acid. Then, polymer composites based on polyamide 6,6 (PA66) and different amounts of functionalized carbon nanofibers have been prepared following different methods: melt

compounding, in-situ polymerization and solvent-aided mixing. The materials have been characterized morphologically (light microscopy, SEM) and their thermal (DSC) and electrical (dielectric spectroscopy) properties have been determined. The data have been compared with those obtained with neat carbon nanofibers. From the results, we conclude that the treatment of the fibers does not introduce improvements in the properties of the nanocomposites. Even more, the electrical behaviour is worse. This fact can be explained if we consider that the nanofibers are broken during the process of functionalization and, as a result, the aspect ratio decreases. In order to obtain systems based on PA66 and GANF with good electrical properties at low percolation thresholds, as it is proposed in the project PET2007_0186_03, we have developed a new procedure that consist essentially of the physical mixing of the polymer matrix, in the form of powder, and the corresponding amounts of CNF. The materials obtained following our procedure present good electrical conductivity at very lower percolation thresholds than those corresponding to systems prepared by melt compounding, which is the method commonly used in the industry

SIMULATION AND EXPERIMENTS OF POLYMERIZATION AND PHYSICAL PHENOMENA IN MACROMOLECULAR SYSTEMS

Catalysts and polymerization.

Experimental results show that the unsubstituted catalyst Ni2 (aldimino PymNox catalyst) is unable to incorporate MA monomer, whereas the methyl substituted Ni1 (acetaldimino PymNox catalyst) is able to achieve copolymerization. The reactivity of both catalysts was examined using Density Functional Theory (DFT) models. Thus, a Curtin-Hammett mechanism is proposed to explain the different reactivity of both catalysts in the ethylene/MA copolymerization. Our results indicate that the methyl substituent Ni1 introduces additional steric hindrance that renders a more suitable catalyst conformation for polar monomer incorporation. This model provides insights into the design of new catalysts to produce polar functionalized copolymers based on ethylene.

Melt macromolecular dynamics and crystallization.

Full Monte Carlo atomistic computer simulations (MC) and experiments of the molecular dimensions and melt dynamics of entangled linear and short chain branched (SCB) polyethylene chains were designed to establish the effect of the molecular architecture on the melt dynamic properties. This strategy allows one to evaluate the density and the intermolecular local packing (chain size) in the melt by mapping of MC simulations on the packing length model. The results obtained illustrate the dependence of the chain dimensions, the entanglement features, and the characteristic relaxation time of the transition with the molecular architecture of polyethylene for short chain branching content between 0 and 55 per 1000 carbon atoms.

Molecular dynamics simulations and experiments of solution crystallization of different PE grades have been performed. This strategy was designed to understand the role of the short chain branches (SCB) on the formation of ordered domains. The crystallization temperature, crystallinity and density calculated from simulations decrease as the number of branches increases as it has been experimentally seen. The formation of order in the copolymers is affected by the amount of the SCB in the backbone of the polymer chain. In the simulations initially the SCB move to the folding surface. Once the SCB are located near the folding surface the order starts to grow. In all cases here shown, the C₄ branches are excluded from the ordered domains in agreement with experimental results.

MOBILITY, ORDER AND NANOSTRUCTURE IN MACROMOLECULAR SYSTEMS

The study of the physical properties in the melt of molecular models of polyolefins has allowed distinguishing the effects of two molecular parameters in the viscoelastic properties; high molecular weight tails and long chain branching. These molecular features cause a similar effect in the linear viscoelastic response. In this context, it is possible to establish correlations, which together with the entanglement parameters found from atomistic simulations, can be applied to reproduce the viscoelastic fingerprint of the models from their molecular features. In what the nanostructure and solid state properties concerns, an exhaustive study of the semicrystalline molecular models has been performed using differential scanning calorimetry, wide angle X-ray scattering, Raman spectroscopy and dynamic-mechanical analysis. The results obtained allow getting a deeper understanding about the complex nature of the phase structure of the semicrystalline polymers and on the relationship between nanostructure and macroscopic physical properties.

SIMULATION OF BIOMACROMOLECULAR SYSTEMS

Cannabinoid receptors CB1 and CB2 are an important class of transmembrane proteins involved in a number of important biological processes. In spite of the inherent similarity (40% in aminoacid sequence) these receptors are found in different cell environments, CB1 is located in certain parts of the brain whereas CB2 can be found in cells associated to the immune system. In addition to this, CB1 activity has been intimately associated to lipid rafts whereas CB2 has not. We have performed a multiananosecond molecular dynamics simulation of the inactive conformations of both receptors inserted in a POPC lipid bilayer. The overall protein structure is maintained along

the simulation in both cases but we have noticed important differences in the protein-lipid interaction. CB1 tends to distort the lipid bilayer regularity, especially in the extracellular moiety, whereas CB2 has a minor influence on the lipid distribution along the plane to the bilayer. This observation is consistent with some experimental facts about these cannabinoid receptors regarding lipid/protein interaction.

Additionally, an exhaustive umbrella sampling simulation of the alanine dipeptide in solution was carried out in the volunteer distributed computing platform Ibercivis. The presence of unexpected Y conformations in solution is assessed by both quantum calculations and experimental data from X-ray and NMR protein-solved structures available in the protein random coil library. The agreement between experimental and simulation Ramachandran plots of the dipeptide in solution is excellent.

BIOPHYSICS: TRIDIMENSIONAL STRUCTURE AND HYDRODYNAMICS OF PROTEINS AND BIOMACROMOLECULAR COMPLEXES

The study of structure and biophysical properties of biomacromolecular complexes as proteins leads to a deeper knowledge about their function in their biological context. With this purpose in mind we have studied proteins implicated in eukaryotic signalling pathways by three dimensional electron microscopy and dynamic light scattering. Our results have shown the global dimensions of these macromolecular complexes and have described their spatial arrangement. The macromolecules studied are involved in important cell processes as external signal detection, environment adaptation and cellular transformation. The structural analysis of these biomacromolecules will shed light on how they work into the cell.

CAPÍTULO 3
PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN

CHAPTER 3
RESEARCH PROJECTS

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

Soluciones exactas y cálculos numéricos de gran escala para sistemas fuertemente correlacionados.

Code or Reference: FIS2009-07277.

Funding Institution: MICINN.

Main Researcher: Jorge Dukelsky Bercovich.

Duration: January/2010-December 2012.

Objectives: Development of new exact and approximate numerical methods for strongly correlated quantum systems, and the application of these techniques to study exotic phases and phase transitions in nuclei and mesoscopic systems.

New computational tools for the modelling of correlations in quantum systems.

Code or Reference: PIE-GA-2008-220335.

Funding Institution: European Commission.

Main Researcher: Jorge Dukelsky Bercovich.

Duration: December 2008- November 2010.

Objectives: Development of new techniques based on exactly solvable models and quantum Monte Carlo exact for modelling quantum systems such as ultracold atomic gases, nuclear matter and non-conventional superconductors.

Temas de gravedad cuántica: gravedad cuántica de lazos, teorías de derivadas y fenómenos críticos.

Code or Reference: FIS2009-11893/FIS.

Funding Institution: MICINN.

Main Researcher: Jesús Fernando Barbero González.

Duration: January 2010-December 2012.

Objectives: Study different aspects of quantum gravity, in particular problems in loop quantum gravity and perturbative formulations.

Reacciones y Estructuras Nucleares Exóticas.

Código o Referencia / Code or Reference: FIS2008-01301.

Entidad Financiadora / Funding Institution: MEC.

Investigador Principal / Main Researcher: Dr. Eduardo Garrido.

Duration: January 2009- December 2011.

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

Cosmología cuántica de lazos, agujeros negros y relatividad numérica.

Code or Reference: FIS2008-06078-C03-03.

Funding Institution: MICINN.

Main Researcher: Guillermo Antonio Mena Marugán.

Duration: January 2009-December 2011.

Objectives: Research in Loop Quantum Cosmology and investigation of the physical predictions of this theory. Application of numerical simulations to General Relativity.

Estudio ab initio espectroscópico de especies moleculares de interés astrofísico. Preparación científica de Herschel y ALMA.

Code or Reference: AYA2008-00446.

Funding Institution: MICINN.

Main Researcher: M^a Luisa Senent Díez.

Duration: 2008-2010.

Objectives: Determination of structural and spectroscopic properties of molecular species of astrophysical relevance: carbon chains and prebiotic molecules.

Organización de las jornadas científicas "Granada 09": métodos teóricos para el estudio de especies moleculares de interés astrofísico.

Code or Reference: AYA2009-05801-E.

Funding Institution: MICINN.

Main Researcher: M^a Luisa Senent Díez.

Duration: 2009-2010.

Objectives: Organization of the Granada 09 workshop and perspectives.

Transporte Cuántico y Decoherencia.

Code or Reference: 200950I213.

Funding Institution: CSIC.

Main Researcher: Rafael Alejandro Molina Fernández.

Duration: January 2010-December 2010.

Objectives: Study the effects of time-periodic external fields in different problems of quantum transport, decoherence and non-equilibrium dynamics.

Participación española en el Centro Europeo de Física Nuclear Teórica y Áreas Relacionadas (ECT*).

Code or Reference: ACI2009-1019.

Funding Institution: MICIN.

Main Researcher: Elvira Moya Valgañón.

Duration: September 2009- September 2010.

Objectives: Spanish participation in the European Center for Theoretical Nuclear Physics and related areas.

Programa CONSOLIDER: Centro Nacional de Física de Partículas, Astropartículas y Nuclear.

Code or Reference: CSD2007-00042.

Funding Institution: MICINN.

Main Researcher: Antonio Pich Zardoya with participation of the Gravitation & Cosmology and Nuclear Theory Groups of the IEM.

Duration: October 2007-November 2012.

Objectives: Development in Spain of particle, astroparticle, nuclear, and theoretical physics, and creation of a national center leading the research in these fields.

COST Action CM0805 “The chemical cosmos; understanding chemistry in astronomical environments”.

Code or Reference: COST Action CM0805.

Funding Institution:

Main Researcher: Nigel Mason (Open University UK).

Duration: 2008-2012.

Objectives: The main objective of this Action is to study chemical processes relevant to the physical conditions encountered in the interstellar medium, and on the surface and in the atmospheres of planetary bodies.

Optimización de procesos en Grids de computadores para la operación de organizaciones virtuales en entornos científicos.

Code or Reference: PCI08-0008.

Funding Institution: Consejería de Educación y Ciencia de Castilla-La Mancha. Junta de Comunidades de Castilla-La Mancha.

Main Researcher: Camelia Muñoz Caro.

Duration: 2008-2010.

Objectives: Development of a computational *Grid* for a virtual organization of Computational Chemistry. The system permits the determination of potential energy hypersurfaces for Astrophysics.

3.2 DPTO. DE FÍSICA NUCLEAR Y FÍSICA ESTADÍSTICA / NUCLEAR PHYSICS AND STATISTICAL PHYSICS

Contribución al Experimento ISOLDE del CERN.

Code or Reference: ICTS-2008-01-11.

Funding Institution: MEC Consolider- Ingenio 2010.

Main Researcher: M^a José García Borge.

Duration: October 2008- June 2010.

Objectives: To pay the Spanish year fee to ISOLDE and to sponsor the trips of the Spanish representative to the Committee meetings.

Estudio de la emisión de partículas tras la desintegración beta.

Code or Reference: FPA2008-04114-E/IN2P3.

Funding Institution: MICIN-IN2P3.

Main Researcher: María José García Borge (IEM, CSIC, España) / Bertram Blank (CENBG, CNRS, Francia).

Duration: June 2009- May 2010.

Objectives: Study of beta-delayed proton emission in the neutron deficient Ar isotopes. And final revision of the review article “Nuclear Structure at the proton drip line: Advances with nuclear decay studies”.

Propiedades de núcleos con halo y avances en el estudio de Reacciones de interés astrofísico.

Code or Reference: FPA2008-04712-E/PORTU.

Funding Institution: MICINN.

Main Researcher: M^a José G^a Borge (IEM, CSIC, Spain) /Daniel Galaviz Redondo (CENBG, Lisboa, Portugal).

Duration: March 2009- February 2010.

Objectives: The objective is to study Coulomb dipolarizability of halo nuclei on heavy targets at energies close to the Coulomb barrier.

Centro Nacional de F. de Partículas, Astropartículas y Nuclear, CPAN.

Code or Reference: CDS2007-00042.

Funding Institution: MEC Consolider- Ingenio 2010.

Main Researcher: Antonio Pich / IP IEM: M^a José García Borge.

Duration: December 2007-December 2012.

Objectives: To create an Institute for particles, astro-particles and nuclear physics research.

Desarrollo de las herramientas de simulación y análisis del experimento R3B.

Code or Reference: CPAN09-TS12.

Funding Institution: CPAN.

Main Researcher: M^a José García Borge.

Duration: 1st February 2009- 1st February 2011.

Objectives: Responsible for the adaptation of the FAIRRoot analysis and simulation tool in the R3B experiment: a computing program called R3BRoot.

Conferencia europea de las perspectivas de la Investigación en Física Nuclear LRP2010.

Code or Reference: CICYT FPA2009-08066-E.

Funding Institution: MICINN.

Main Researcher: M^a José García Borge.

Duration: February 2010-March 2010.

Objectives: The European Nuclear Physics community was assembled in this conference to discuss and validate the long range Plan for the Nuclear Physics in Europe for the next decade and beyond.

Contribución española a STS2 (Science and Technology Facilities country)-Primer año.

Code or Reference: MAT2008-04191-E

Funding Institution: MICINN.

Main Researcher: Javier Bermejo Barrera.

Duration: January 2009-December 2011.

Objectives: Neutron scattering advance instrumentation development for the amplification of ISIS installation.

Dinámica y estructura de núcleos exóticos ligeros. Prototipo de doble cristal para el calorímetro CALIFA del experimento R3B en FAIR.

Code or Reference: CICYT FPA2007-62170.

Funding Institution: MCYT.

Main Researcher: Olof Tengblad.

Duration: October 2007- March 2010.

Objectives: Development of detectors and electronics in order to perform nuclear structure studies.

Dinámica y estructura de núcleos exóticos. CALIFA-DB1. Un demostrador del Calorímetro del experimento R3B en FAIR.

Code or Reference: CICYT FPA2009-07387.

Funding Institution: MICINN.

Main Researcher: Olof Tengblad.

Duration: January 2010- December 2012.

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

Correlaciones espacio-temporales a nanoescalas: efectos de heterogeneidad, desorden y confinamiento

Code or Reference: MAT2007-65711-C04-01

Funding Institution: MEC.

Main Researcher: Carlos Cabrillo García.

Duration: January 2007-December 2010.

Objectives: Study of the effects, due to the decrease in spatial dimensions, in nano-structured and nano-confined systems physical properties.

The study of exotic nuclei using gamma-ray spectroscopy

Code or Reference: FPA2009-13377-C02-02

Funding Institution: DGI-MEC.

Main Researcher: Andrea Jungclauss.

Duration: January 2010-December 2011.

Objectives: Study of exotic nuclei using γ -ray spectroscopy and radioactive ion beams available at leading European laboratories, in particular measurements of magnetic moments of short-lived excited states using transient field techniques. Study of exotic nuclei using γ -ray spectroscopy and radioactive ion beams available at leading European laboratories, in particular measurements of magnetic moments of short-lived excited states using transient field techniques.

PROYECTOS CON LA INDUSTRIA / PROJECTS WITH INDUSTRIAL COMPANIES

Desarrollo de inyectores de potencia para aceleradores de protones de última generación.

Code or Reference: FETS.

Company: CDTI - Programa Nacional del Espacio.

Main Researcher: Francisco Javier Bermejo.

Duration: January 2007- December 2011.

Objectives: Design and construction of a test bank for the development of the next generation of high power proton accelerator.

Desarrollo de instrumentación para fuentes de neutrones.

Code or Reference: 20101646.

Company: ESS-BILBAO.

Main Researcher: Francisco Javier Bermejo.

Duration: January 2007- December 2011.

Objectives: Design of neutron scattering advance instrumentation.

3.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS

Microdispositivos ópticos sensores resonantes (MICROSERES).

Code or Reference: S2009/TIC1476, Subproject IEM.

Funding Institution: Comunidad de Madrid.

Main Researcher: Subproject IEM: Concepción Domingo Maroto. (IP project: J.J. Sáenz, UAM).

Duration: January 2010-December 2013.

Objectives: Development of SERS and SEF molecular nanosensors.

Física molecular de hielos y plasmas atmosféricos y astrofísicos. Estudios de laboratorio y simulaciones teóricas.

Code or Reference: FIS2007-61686.

Funding Institution: Ministerio de Educación y Ciencia.

Main Researcher: R. Escribano.

Duration: October 2007- March 2011.

Objectives: Laboratory investigation of analogues of systems of astrophysical and atmospheric interest, in particular comet nuclei, cold plasmas in the ionospheres of Titan and Earth, and cloud aerosol particles.

Molecular Astrophysics: The Herschel and ALMA Era.

Code or Reference: CSD2009-00038.

Funding Institution: MICINN. CONSOLIDER-INGENIO 2010 Program.

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

Coordinator: José Cernicharo Quintanilla.

Duration: January 2010-December 2014.

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

Espectroscopía láser de gases de interés en la atmósfera o en procesos de combustión.

Code or Reference: FIS2009-08096.

Funding Institution: MICINN.

Main Researcher: José Luis Doménech.

Duration: January 2010-December 2012.

Objectives: Laboratory measurement of frequencies, broadening coefficients and other parameters of interest for the interpretation of field measurements and validation of potential energy surfaces and or calculation methods.

Colisiones moleculares de interés astrofísico y atmosférico.

Code or Reference: FIS2007-61430.

Funding Institution: MEC.

Main Researcher: José M^a Fernández Sánchez.

Duration: October 2007-September 2010.

Objectives: Study of the inelastic collisions of CO, H₂, H₂O with H₂ and He at the molecular scale, to determine the state-to-state transfer coefficients at low temperature.

Investigation of superfluidity in highly supercooled para-hydrogen by means of inelastic light scattering.

Code or Reference: HD2008-0068.

Funding Institution: MICINN.

Main Researcher: José M^a Fernández Sánchez.

Duration: January 2009-December 2010.

Objectives: Prospective experiments to search for the predicted superfluidity in liquid para-hydrogen.

Efectos de oxidación de materiales en ITER.

Code or Reference: WP09-PWI-02-05.

Funding Institution: CIEMAT.

Main Researcher: Isabel Tanarro.

Duration: January – June 2010.

Objectives: Removal of hard amorphous hydrogenated carbon (a-C:H) films from narrow gaps simulating the macro-brush structures present in controlled fusion devices, by heating in NO₂ rich atmospheres.

Thermo-oxidation by NO₂.

Funding Institution: Línea Instrumental de Actuación de Infraestructuras Científico-Tecnológicas del Plan Nacional de Investigación Científica, MICIN - Instituto de Sistemas Optoelectrónicos y Microtecnología (ISOM) (UPM).

Main Researcher: Isabel Tanarro.

Duration: March– April 2010.

Objectives: Study of the depth and composition of (a-C:H) films after different deposition and erosion processes, by profilometry and by energy-dispersive X-ray spectroscopy (EDX), respectively.

Coherent control of molecular states with ultrafast laser pulses.

Code or Reference: DE2009-0088.

Funding Institution: MICINN.

Main Researcher: Mirta Rodríguez Pinilla.

Duration: January 2010-December 2011.

Objectives: Modelling and analysis of photon-induced charge-transfer in molecules including control by external fields and relaxation processes.

3.4 DPTO. DE ESPECTROSCOPIA VIBRACIONAL Y PROCESOS MULTIFOTÓNICOS / VIBRATIONAL SPECTROSCOPY AND MULTIPHOTON PROCESSES

Nanosensores Moleculares basados en plasmones superficiales localizados: SERS, SEIRA y SEF.

Code or Reference: FIS2007-63065.

Funding Institution: Ministerio de Ciencia e Innovación.

Duration: October 2007-March 2011.

Project Leader: José Vicente García Ramos.

Objectives: Detection of compounds of environmental interest or pigments of artistic interest at the trace level or single molecules by using metal nanoparticles properly functionalized.

Desarrollo de métodos de diagnóstico de la enfermedad de Alzheimer mediante espectroscopía vibracional: identificación y estructura molecular de biomarcadores periféricos y centrales.

Code or Reference: CTQ2009-09538.

Funding Institution: Ministerio de Ciencia e Innovación.

Main Researcher: Pedro Carmona Hernández.

Duration: January 2010-December 2012.

Objectives: Study the infrared and Raman spectra of blood components as tools for early diagnosis of neurodegenerative diseases.

NANoantenas Ópticas PLASmónicas (NANOPLAS)

Code or Reference: FIS2009-11264.

Funding Institution: Ministerio de Ciencia e Innovación.

Main Researcher: José A. Sánchez Gil.

Duration: January 2010-December 2012.

Objectives: To investigate theoretically nanophotonic processes mediated by the excitation of localized surface plasmons on metallic nanostructures (nanoantennas).

Engineering METamaterials (EMET)

Code or Reference: CSD2008-00066.

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

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

Coordinator: Javier Martí Sendrá (NTC-UPV).

Duration: January 2009-December 2013.

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

Programa de investigación en Tecnologías para la Valoración y Conservación del Patrimonio (TCP)

Code or Reference: CSD 2007-00058.

Funding Institution: Ministerio de Educación y Ciencia., Programa Consolider-Ingenio.

Main Researcher: Felipe Criado.

Duration: 2007-2012.

Objectives: Study of the Cultural Heritage by spectroscopic techniques.

Microdispositivos ópticos sensores (MICROSERES II).

Code or Reference: S-2009/TIC1476, Subproyecto IEM.

Funding Institution: Comunidad de Madrid.

Project Leader: Subproyecto IEM: Concepción Domingo Maroto.

Coordinator: Juan J. Sáenz, UAM.

Duration: 2010-2013.

Objectives: Development of SERS and SEIRA molecular nanosensors.

Durabilidad y conservación de geomateriales del Patrimonio construido.

Code or Reference: S2009/Mat-1629.

Funding Institution: Comunidad de Madrid.

Main Researcher: Rafael Fort González.

Duration: January 2010-December 2013.

Objectives: Study the mechanism and process of weathering of geomaterials and to develop new strategies for its protection and conservation in order to make more durable building material.

Química física de plasmas de ablación y disociación láser para la deposición de nanoestructuras.

Code or Reference: CTQ2007-60177/BQU.

Funding Institution: Ministerio de Ciencia e Innovación.

Main Researcher: Marta Castillejo Striano.

Duration: October 2007-December 2010.

Objectives: Study of the gas phase reactivity and properties of species generated in the ablation plume and photodissociation plasmas that are intermediates for the deposition of certain nanostructured materials.

Investigation of the interaction of thioflavin with amyloids involved in age-related degenerative diseases by a combined surface-enhanced Raman and fluorescence spectroscopy study.

Code or Reference: 2009SK0006.

Funding Institution: Acuerdo CSIC-Academia de Ciencias Eslovaca.

Duration: 2010-2011.

Investigador Principal: Santiago Sánchez Cortés.

Objectives: SERS+SEF characterization of the interaction between Alzheimer marker thioflavin and its biological target, i.e. the peptide amyloid.

Tipología de tintas, colorantes y pigmentos de manuscritos medievales islámicos en Marruecos y en España.

Code or Reference: 2009MA0005.

Funding Institution: Acuerdo CSIC-CNRST(Marruecos).

Duration: 2010-2011.

Investigador Principal: Santiago Sánchez Cortés.

Objectives: Spectroscopic study of dyes and pigments employed in ancient Islamic manuscripts.

Preparación y caracterización de sistemas transportadores de principios biológicos.

Code or Reference: GR58/08-Grupo 950247.

Funding Institution: Universidad Complutense de Madrid.

Main Researcher: Francisco García Blanco.

Duration: January 2009-December 2010.

Objectives: Development of new drug delivery systems.

Electrocatalisis de pilas de combustible: electroquímica de superficies y nuevos nanocatalizadores

Code or Reference: PLE2009-0008.

Funding Institution: MICINN, ACI-PLAN E (cooperación España-Japón Nanotecnología y Nuevos Materiales).

Main Researcher: Ángel Cuesta.

Duration: 2009-2012

Objectives: Study of surfaces with Spectroscopic techniques with possible implications in catalysis and electrochemical processes.

3.5 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

Estructura, dinámica y sus interrelaciones en materiales poliméricos nanoestructurados en una, dos y tres dimensiones.

Code or Reference: MAT2009-07789.

Funding Institution: Ministerio de Ciencia e Innovación.

Main Researcher: Tiberio A. Ezquerro Sanz.

Duration: January 2010-December 2012.

Objectives: To advance in the understanding of the underlying physics soft matter nanostructuring.

Carbon Nanotubes as Potential Templates for Polymer Crystallization in Bulk and in Thin Film Materials.

Code or Reference: Deutsches Elektronen Synchrotron (DESY) II-20060160.

Funding Institution: EU.

Main Researcher: Tiberio A. Ezquerro Sanz.

Duration: January 2007-December 2010.

Objectives: To investigate the potential use of carbon nanotubes as templates in polymer nanocomposites.

Visualización y simulación de la influencia del plegado macromolecular en la formación de cristales poliméricos y en la funcionalidad de proteínas.

Code or Reference: MAT2009-12364.

Funding Institution: Ministerio de Ciencia e Innovación.

Main Researcher: Javier Martínez de Salazar Bascañana.

Duration: 2010-2012.

Objectives: This project is focussed on the determination of the role of the macromolecular folding in the formation of polymer single crystals and co-crystallisation of linear and branched macromolecules, and also on the conformational changes in proteins as a consequence of the interaction with ligands.

Fundamentos de la nanoestructuración volúmica y superficial de copolímeros en bloque.

Code or Reference: MAT2008-03232/NAM.

Funding Institution: Ministerio de Ciencia e Innovación.

Main Researcher: Aurora Nogales.

Duration: January 2009-December 2011.

Objectives: Study of the fundamentals that determine volume and surface nanostructuring in block copolymers.

Nanoestructuras poliméricas multilaminares: aproximación a un apilamiento de láminas bidimensionales. / Multilayered Polymer Nanostructures: an Approach towards Stacked Two-dimensional Layers.

Code or Reference: FIS2007-60534.

Funding Institution: MEC.

Main Researcher: Fernando Ania García.

Duration: November 2007-November 2010.

Objectives: Study of nanolayered systems, composed by an alternate stack of thin layers of two immiscible homopolymers, covering, both, the detailed analysis of the layered nanostructure and the changes brought about by this peculiar architecture on several physical properties, specially as layer thickness decreases below a critical value (confinement in one dimension).

Propiedades viscoelásticas de sistemas poliméricos nanoestructurados mediante nanoindentación

Code or Reference: FIS2010-18069.

Funding Institution: Ministerio de Ciencia e Innovación.

Main Researcher: Fernando Ania García.

Resolution: 4th of October 2010. *Duration:* 1st January 2011- 31st December 2013.

Objectives: The general objective of the present project is to study finite size effects on the physical properties of nanostructural polymer systems such as: thin films, polymer composites and copolymers. The mechanical properties derived from nanoindentation, together with microcalorimetry data, will be compared to the values associated to the bulk.

Estudio de la microestructura de nanocomposites basados en materiales poliméricos modificados mediante extrusión reactiva.

Code or Reference: A/027399/09

Funding Institution: Spanish Agency of International Cooperation for the Development (AECID)-MAEC

Main Researcher: M^a Esperanza Cagiao Escohotado.

Duration: January 2010-January 2011

Objective: Study of thermoplastic polymers reversibly crosslinked in the molten state by reactive extrusion. Application of this method to the preparation of polymer/clay nanocomposites.

Nanofibras y nanotubos poliméricos: Efectos de confinamiento en la estructura y propiedades físicas.

Code or Reference: PIE 2009501088.

Funding Institution: CSIC.

Main Researcher: Mari Cruz García Gutiérrez.

Duration: January 2010-December 2010.

Objectives: Investigation of the confinement effects on the structure and physical properties of polymer nanofibers and nanotubes.

Nanostructuring polymers in one and two dimensions.

Code or Reference: II-20100103 EC.

Funding Institution: Hamburger Synchrotronstrahlungslabor, DESY HASYLAB, Hamburg (Germany).

Main Researcher: Mari Cruz García Gutiérrez.

Duration: June 2010-June 2012.

Objectives: Structural studies of confined systems by means of grazing incidence X-ray scattering with synchrotron light.

Investigación de la conductividad eléctrica en materiales compuestos poliméricos con nanofibras de carbono óptimamente dispersadas.

Code or Reference: Proyecto PETRI (PET-2007-0186-03).

Funding Institution: MICINN.

Main Researcher: Amelia Linares Dos Santos.

Duration: January 2008-December 2010.

Objectives: Study of the electric properties of polymeric composites materials with carbon nanofibers prepared by different methods.

Study of polymer Nanostructures under Confinement as Revealed by WAXS, SAXS and USAXS.

Code or Reference: Deutsches Elektronen Synchrotron (DESY) II-20070031.

Funding Institution: EU.

Main Researcher: Francisco J. Baltá Calleja.

Duration: 2007-2011.

Objectives: Structural studies of multilayered systems by means of X-ray synchrotron radiation.

PROYECTOS CON LA INDUSTRIA / PROJECTS WITH THE INDUSTRIAL COMPANIES

Study of the molecular effects on the kinetics of melt miscibility between LLDPE and LDPE, and its modification with external means. II.

Company: DOW Chemicals Ibérica.

Main Researcher: Javier Martínez de Salazar Bascuñana and Juan Francisco Vega Borrego.

Duration: 1 January 2009-30 April 2010.

Objectives: The fundamental aspects of this project are directed towards the study of the rheological behavior of molten blends of linear low density polyethylene and other polyolefins, and its correlation with the molecular structure and the properties of the components.

Cenit Infinetex: Investigación de nuevas funcionalidades e inteligencia implementadas en textiles.

Company: Francisco Albero, S.A. (FAE, S.A.).

Main Researcher: Tiberio A. Ezquerro Sanz.

Duration: July 2010-July 2012.

Objectives: To implement functionality in different types of textiles and composite materials aiming to achieve self-regulating properties.

CAPÍTULO 4
COOPERACIÓN CIENTÍFICA

CHAPTER 4
SCIENTIFIC COOPERATION

4.1 CONGRESOS Y REUNIONES NACIONALES / NATIONAL CONGRESSES AND MEETINGS

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

2nd Jerte Advanced Relativity Meeting, Navaconcejo, 24th -28th of March 2010.

- *Alice through the Big Bounce* (Oral presentation), Guillermo A. Mena Marugán.
- *Scattering the Quantum Universe or How Sharp is the Universe's Memory?* (Oral presentation), Tomasz H. Pawłowski.
- *The Two Faces of Quantum Sound* (Oral presentation), Luis J. Garay Elizondo.
- *Hybrid Quantization of the Gowdy Model within Two Different Schemes* (Oral presentation), Mercedes Martín Benito.
- *Hybrid Inhomogeneous Cosmologies* (Oral presentation), Daniel Martín-de Blas.
- *Klein-Fock-Gordon equation (with a time-dependent mass) leads to a unique Fock Quantization on S³* (Oral presentation), Javier A. Olmedo Nieto.

XXVIII Congreso Anual de la Sociedad Española de Ingeniería Biomédica (CASEIB 2010), Leganés (Spain), 24-26th of November 2010.

- *Corrección de atenuación de imágenes PET usando datos de TAC en el escáner para animales pequeños Argus PET/CT* (Poster), Esther Vicente Torrico.

VI Encuentro de Física Nuclear, El Escorial (Spain), 24-26th of November 2010.

- *Extraction of Information from CT Images for PET and Radiotherapy Planning* (Oral contribution), Esther Vicente Torrico.

4.1.2 DPTO. DE FÍSICA NUCLEAR Y FÍSICA ESTADÍSTICA / NUCLEAR PHYSICS AND STATISTICAL PHYSICS

V Encuentro de Física Nuclear 2010, El Escorial (Madrid), 27-29th of September, 2010.

- *Estudio de los coeficientes de conversión en la desintegración del ⁷²Kr* (Oral presentation), J. Antonio Briz.
- *Towards the R3B End Cap in Phoswich Configuration* (Oral contribution), José Sánchez del Río, J. Antonio Briz, Mariano Carmona, O. Tengblad.

4.1.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS

Ciencia y Arte III, Valencia, 17-18th of November 2010.

- *Técnicas de espectroscopía Raman aplicadas en Conservación. Ventajas e inconvenientes* (Invited talk), C. Domingo.

XXVI Trobades Científiques de la Mediterrània - Correlations in Quantum Gases, Maó (Menorca), 30th of September-2nd of October 2010.

- *Long-lasting directed current despite time reversal symmetry* (Poster), J. Santos, R. Molina, J. Ortigoso and M. Rodríguez.

4.1.4 DPTO. DE ESPECTROSCOPÍA VIBRACIONAL Y PROCESOS MULTIFOTÓNICOS / VIBRATIONAL SPECTROSCOPY AND MULTIPHOTON PROCESSES

Conferencia Española de Nanofotónica, Segovia, 15-18th of June 2010.

- *Plasmon Optical Nanoantennas: Characterization, Design, and Applications in Nanophotonics* (Oral presentation), R. Rodríguez-Oliveros, R. Paniagua, J. A. Sánchez-Gil, V. Giannini, D. Macías, and J. Gómez Rivas.

- *Enhanced backscattering of light from randomly rough gratings on negative magnetic meta-materials* (Poster), R. Paniagua-Domínguez, J. A. Sánchez-Gil, P. Albella, J. M. Sáiz, F. González, and F. Moreno.

ARPA 2010, Valladolid, 12-14th of November 2010.

- *Morteros en el Patrimonio* (Poster), M. Teresa Blanco-Varela, Sagrario Martínez-Ramírez, Sara Goñi Erizalde, Ana M. Guerrero Bustos, Virtudes Azorín, M. Isabel Sánchez de Rojas, Moisés Frías, Paula M. Carmona-Quiroga.

4.1.5 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

February Discussion Meeting of the Soft Condensed Matter Group, Madrid, 23rd of February 2010.

- *La curiosa dinámica de las estrellas de goma*, Tiberio A. Ezquerro Sanz.
- *Relajación dieléctrica en copolímeros PVDF-TrFE. Efectos de confinamiento*, Aurora Nogales Ruíz.
- *Análisis mediante GISAXS de redes nanométricas superficiales*, Daniel R. Rueda Bravo.
- *Aplicación de la dispersión de rayos X con incidencia rasante al análisis estructural de películas delgadas con morfología columnar*, Mari Cruz García-Gutiérrez.
- *Confinamiento, cooperatividad y fragilidad en PVDF semicristalino*, Amelia Linares Dos Santos.
- *Dispersión de neutrones: elasticidad, inelasticidad, coherencia e incoherencia*, Alejandro Sanz Parras.
- *Influencia de la presencia de nanotubos de carbono en la cristalización de películas delgadas de poliésteres aromáticos*, Jaime J. Hernández Rueda.
- *Síntesis y caracterización de materiales compuestos de matriz polimérica con nanopartículas magnéticas*, Ignacio Martín-Fabiani Carrato.

Reunión Proyectos del Plan Nacional, Área de Física, Barcelona, 22nd of March 2010.

- (Participation), Fernando Ania García.

Estructura y Función de Proteínas, VI Reunión de la Red Temática Nacional, CSIC, Madrid, 21th-23th April 2010.

- *Microscopía electrónica de macromoléculas biológicas. Estructura de una polimerasa replicativa eucariota* (Oral contribution), R. Núñez-Ramírez, J.F. Vega and J. Martínez-Salazar.

Reunión Proyecto Petri (PET2007-186-03), Alicante, 1st of June 2010.

- (Participation), Tiberio A. Ezquerro Sanz and Amelia Linares Dos Santos.

V Reunión de la Sociedad Española de Técnicas Neutrónicas (SETN), Gijón, Asturias, 28-30th of June 2010.

- (Participation), Alejandro Sanz Parras.

XII Congreso Nacional de Propiedades Mecánicas de Sólidos, Aránzazu-Oñate, Guipúzcoa, 14-17th of September 2010.

- *Aplicación de técnicas de indentación al estudio de las propiedades mecánicas de polímeros* (Invited Lecture), Araceli Flores Aguilar-Amat.

November Discussion Meeting of the Soft Condensed Matter Group, Madrid, 4th of November 2010.

- *Viendo el ADN en lipoplexos mediante SAXS a través de los ojos de un/a físico/a*, Aurora Nogales Ruíz.
- *Entrecruzamiento reversible de iPP: Algunos aspectos interesantes*, M^a Esperanza Cagiao Escotado.
- *Diameter selection of carbón nanotubes in one-dimensional polymer nanocomposites by template wetting*, M^a Cruz García-Gutiérrez.
- *Investigación de la conductividad eléctrica de materiales compuestos basados en PA66 y nanofibras de carbono con diferente funcionalidad*, José Carlos Canalda Cámara.
- *Informe final proyecto Petri y discusión de algunos resultados*, Amelia Linares Dos Santos.
- *Phase separation in photoconductive polymer blends at the nanometre scale: Polymer Solar Cells*, Alejandro Sanz Parras.
- *Relajaciones sub-vítreas en nuevas poliimidas aromáticas con aplicación en la separación de gases*, Cristina Álvarez.
- *Cristalización isotérmica de PTT: ¿es eterna?*, Ignacio Martín-Fabiani Carrato.
- *Nanoestructuración superficial de polímeros inducida por Láser: Paracrystallinity or not Paracrystallinity, that is the question!*, Tiberio A. Ezquerro Sanz.
- *Reflexión múltiple en los diagramas GISAXS de redes nanométricas*, Daniel R. Rueda Bravo.
- *Proyecto Humboldt*, Jaime J. Hernández Rueda.

4th Spanish Workshop on Nanolithography, Oviedo, 10-12th of November 2010.

- *Laser Induced Periodic Structures (LIPSS) on Polymeric Thin Films* (Invited lecture), Tiberio A. Ezquerro Sanz.

Jornada Técnicas de caracterización de nanocompuestos y nanomateriales, Instituto Tecnológico del Plástico (AIMPLAS), Valencia, 24th of November 2010.

- *Espectroscopia Raman y Difracción de Rayos X como herramientas para la caracterización de sistemas nanocompuestos* (Invited lecture), M^a Cruz García-Gutiérrez.

4.2 CONGRESOS Y REUNIONES INTERNACIONALES / INTERNATIONAL CONGRESSES AND MEETINGS

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

XXXIII Symposium on Nuclear Physics, Cocoyoc (Mexico), 5th-8th of January 2010.

- o *Quantum chaos and 1/f noise* (Invited talk), Rafael A. Molina, A. Relaño, J.M.G. Gómez, J. Retamosa, L. Muñoz, E. Faleiro.

3rd Workshop on Aspects of Quantum Gravity, Covilha (Portugal), 9th-12th of February 2010.

- o *Symmetry Reductions in General Relativity* (Invited minicourse), Guillermo A. Mena Marugán.
- o *Uniqueness of the Quantization of a Linear Scalar Field on S³* (Invited talk), Guillermo A. Mena Marugán.
- o *Introduction to Loop Quantum Cosmology* (Invited minicourse), Mercedes Martín Benito.
- o *One Step beyond in Loop Quantum cosmology* (Oral contribution), Javier A. Olmedo.

Multidisciplinary Workshop on the Random Phase Approximation and extensions, Paris (France), 26th-29th of February 2010.

- o *RPA selfconsistency and the killing condition* (Invited Talk), Jorge Dukelsky.

Weakly Bound Systems in Atomic and Nuclear Physics, Seattle (USA), 8th-12th of March 2010.

- o *Three-body resonances and applications in Nuclear Astrophysics* (Invited talk), Eduardo Garrido Bellido

APS March Meeting 2010, Portland (USA), 15th-19th of March 2010.

- o *Interplay between electronic excitations and flexural phonons in graphene* (Oral contribution), José González and Pablo San-José.
- o *Quantum pumping in graphene* (Oral contribution), Elsa Prada, Pablo San-José and Henning Schomerus.

Collisions moléculaires inélastiques, Tunisie-Hammamet, 18th-20th of March 2010.

- o *Ro-vibrational inelastic collisions of small astrophysical species with He and H₂* (Invited talk), M. L. Senent

Iberian Cosmology Meeting 2010, Porto (Portugal), 29th-31st of March 2010.

- o *Can Renormalization Change the Observable Predictions of Inflation?* (Oral contribution), Gonzalo J. Olmo.

Workshop on Molecular Complexes in our Atmosphere and Beyond, Brussels, 20th-23th of April 2010.

- o *Ro-vibrational inelastic collisions of small astrophysical species with He and H₂* (Oral contribution), M.L. Senent.

2nd Amazonian School on Quantum Theory and Applications, Universidad Federal de Pará, Belém (Brazil), 17th-21st of May 2010.

- o *Gravitational Analogs* (Invited minicourse, 6 hours), Luis J. Garay.

29th International Workshop on Nuclear Theory, Rila Mountains (Bulgaria) 20th-26th of June 2010.

- o *Microscopic description of ground and onequasiparticle states in neutron-rich Sr, Zr and Mo isotopes with the Gogny energy Density Functional* (Invited talk), R.Rodríguez-Guzmán, P.Sarriguren and L.M.Robledo.
- o *Momentum distributions in medium and heavy exotic nuclei* (Invited talk), M.K. Gaidarov, G.Z. Krumova, P. Sarriguren, A.N. Antonov, M.V. Ivanov and E. Moya de Guerra.

Joint 2010 National Nuclear Physics Summer School (NNPSS) and 2010 TRIUMF Summer Institute (TSI), Vancouver (Canada), 21st June-2nd of July 2010.

- o (Participation) Carolina Romero Redondo

Molecular Spectroscopy Conference, Ohio State University, June 2010.

- o *Characterization and formation processes of C_4^- , C_4H and C_4H^+* (Oral contribution), M.L.Senent, V.Brites and M.Hochlaf.
- o *Characterization of C_3SiH* (Oral contribution), N. Inostroza and M.L.Senent.
- o *Dimethyl ether three dimensional spectra* (Oral contribution), M.Villa and M.L.Senent.

International Nuclear Physics Conference, INPC2010, Vancouver (Canada) 4th-8th of July 2010.

- o *Neutron densities from parity-violating elastic electron scattering* (Poster), O. Moreno, P. Sarriguren, E. Moya de Guerra, J.M. Udías, T.W. Donnelly and I. Sick.
- o *Remodelling the spin-orbit term of Skyrme energy density functional* (Poster), E. Moya de Guerra, O. Moreno and P. Sarriguren.
- o *Multichannel reactions using the adiabatic expansion method* (Poster), Carolina Romero Redondo.

CECAM Workshop on superconductivity in nanosized systems, Lausanne (Switzerland), 5th-8th of July 2010.

- o *Theoretical framework of superconductivity in carbon nanotubes* (Invited talk), José González.

19th International Conference on General Relativity and Gravitation (GR19), Mexico D. F. (Mexico), 5th -9th of July 2010.

- o *How Sharp is the Universe's Memory?* (Oral contribution), Tomasz Pawłowski.

Workshop on Fundamental Symmetries FUNSYM2010, Vancouver (Canada) 9th-10th of July 2010.

- o *Parity-violating electron scattering and nuclear isospin mixing* (Oral contribution), O. Moreno, P. Sarriguren, E. Moya de Guerra, J.M. Udías, T.W. Donnelly and I. Sick.

Dynamic Days Asia Pacific 6, Sydney (Australia), 12th -14th of July 2010.

- o *Time series analysis applied to quantum chaos* (Oral contribution), Rafael A. Molina, A. Relaño, J.M.G. Gómez, J. Retamosa, L. Muñoz, E. Faleiro.

XXIV IUPAP Int. Conference on Statistical Physics STATPHYS24, Cairns (Australia), 19th -23rd of July 2010.

- o *Conductance distribution of ac driven quantum wires* (Poster), Rafael A. Molina, V.A. Gopar.

4th Mexican Meeting in Mathematical and Experimental Physics Symposium on: Cosmology, Gravitation, and BEC's Phenomenology, Universidad Autónoma Metropolitana, Mexico D.F. (Mexico), 19th -23rd of July 2010.

- o *Two Faces of Quantum Sound* (Invited talk), Luis J. Garay.

International Conference on Atomic Physics 2010, Cairns (Australia), 25th -30th of July 2010.

- o *Physics of $SU(3)$ cold atom gases: crystallization and color-charge separation* (Poster), Rafael A. Molina, P. Schmitteckert, J. Dukelsky, R. Thomale, T. Ullbricht.

2nd Workshop on Matrix elements for neutrinoless double-beta decay, Dresden (Germany), 28th -30th of July 2010.

- o *Theoretical quasiparticle mean field and experimental occupation probabilities in the ^{76}Ge to ^{76}Se double-beta decay system and related issues* (Invited talk), E. Moya de Guerra, O. Moreno, P. Sarriguren and A. Faessler.

International Workshop on Statistical Physics of Quantum Systems Tokyo (Japan), 2nd -4th of August 2010.

- o *Conductance distribution of ac driven quantum wires* (Poster), Rafael A. Molina, V.A. Gopar.

3rd International Conference on Frontiers in Nuclear Structure, Astrophysics and Reactions FINUSTAR3, Rhodes (Greece), 23rd -27th of August 2010.

- o *Selected topics on Nuclear Structure in Electroweak processes* (Oral contribution), E. Moya de Guerra, O. Moreno and P. Sarriguren.
- o *Signatures of structural changes in neutron-rich Sr, Zr and Mo isotopes* (Oral contribution), R. Rodríguez-Guzmán, P. Sarriguren and L.M. Robledo.
- o *Weak decay rates for neutron-deficient Kr isotopes relevant for the rp process* (Oral contribution), P. Sarriguren.

21st European Conference on Few-body problems in Physics, Salamanca (Spain), 29th of August-3rd of September 2010.

- o *Multichannel reactions using the adiabatic expansion method* (Oral contribution), C. Romero Redondo
- o *Relative production rates of ^{12}C , ^9Be , and ^6He in astrophysical environments* (Oral contribution), R. de Diego Martínez

Spanish Relativity Meeting 2010, Granada, 6th-10th of September 2010.

- o *Black hole entropy: lessons from loop quantum gravity* (Invited talk), Fernando Barbero.
- o *Loop Quantum Cosmology: A Cosmological Theory with a View* (Invited talk), Guillermo A. Mena Marugán.
- o *Non-Singular Universes à la Palatini* (Oral contribution), Gonzalo J. Olmo.
- o *Quantum Gowdy Model within the New LQC Improved Dynamics* (Oral contribution), Mercedes Martín Benito.
- o *Further Improvements in the Understanding of Isotropic Loop Quantum cosmology* (Oral contribution), Javier A. Olmedo.

7th Workshop on Disordered Systems, Puebla (Mexico), 20th -24th of September 2010.

- o *Controlling conductance statistics of quantum wires by driving ac fields* (Invited talk), Rafael A. Molina, V.A. Gopar.

XXVI Trobades Científiques de la Mediterrània: Correlations in Quantum Gases, Menorca (Spain). 30th of September-2nd of October 2010.

- o *Integrable pairing models in cold atom physics* (Invited Talk), Jorge Dukelsky.

Cost Action: The Chemical Cosmos: Annual conference, Grenoble, October 2010.

- o *CCSD(T) study of the far-infrared spectrum of complex molecules: DME and EME* (Oral contribution), M.L.Senent.

4th Meeting on High Performance Computing in Molecular Simulations, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 30th of September- 1st of October 2010.

- o *CCSD(T) study of the far-infrared spectrum of complex molecules: dimethyl-ether and ethyl-methyl-ether* (Oral contribution), M.L.Senent.

2010 Nuclear Science Symposium and Medical Imaging Conference, Knoxville, Tennessee (USA), 30th of October-6th of November 2010.

- o *Validation of NEMA NU4-2008 Scatter Fraction Estimation with ^{18}F and ^{68}Ga for the ARGUS Small-Animal PET Scanner* (Poster), Esther Vicente Torrico.

Sixth International meeting “Mathematical Methods for Ab Initio Quantum Chemistry, Niza, November 2010.

- o *Ab initio studies of the far-infrared spectrum of non-rigid molecules of astrophysical interest* (Invited talk), M.L.Senent.

New experimental and theoretical developments in molecular spectroscopy: atmospheric and astrophysical applications, Soleil, Saint Aubin, November 2010.

- o *Theoretical spectra analysis for the torsional and COC bending degrees of freedom of dimethyl ether (CH_3OCH_3)* (Poster), O.Alvarez-Bajo, M.Carvajal, R.Domínguez-Gómez, M.Villa and M.L.Senent. ¿?

4.2.2 DPTO. DE FÍSICA NUCLEAR Y ESTADÍSTICA / NUCLEAR PHYSICS AND STATISTICAL PHYSICS

R3B Collaboration meeting, Santiago de Compostela (Spain), 4-6th of February 2010.

- o *CALIFA R&D on ReadOut electronics* (Oral contribution), O. Tengblad, José Sánchez del Río , Ángel Perea.

Joint R3B/EXL/ELISE Collaboration, Darmstad (Germany), 13-16th April 2010.

- o *Towards the R3B CALIFA end cap* (Oral contribution), Olof Tengblad, José Sánchez del Río and Angel Perea.

10th International Workshop on Non Crystalline Solids (10 IWNCs), Barcelona (Spain), 21-23th of April 2010.

- o *Conformidad disorder influence on the properties of a fragile orientational glass* (Oral contribution), M. Rovira-Esteva, A. Murugan, M.D. Ruiz-Martín, L.C. Pardo, J. Ll. Tamarit, F. J. Bermejo, G.J. Cuello.

- o *Influence of conformational disorder into the low-temperature thermal conductivity for structural and orientational glasses* (Poster), [A.I. Krivchikov](#), I.V. Sharapova, O.A. Korolyuk, C. Cabrillo, L.C. Pardo, M. Rovira-Esteva, J.L. Tamarit, M.D. Ruiz-Martín and F.J. Bermejo.

Workshop on Nuclear Isomers: Structure and Applications, University of Surrey, Guildford, (UK), 19-21st of May 2010.

- o *Isomer spectroscopy after fragmentation and fission reactions at relativistic energies* (Invited talk), [Andrea Jungclauss](#).

European Radioactive Ion Beam Conference (EURORIB 2010), Lamoura (France), 6-11th of June 2010.

- o *Dynamic studies of ^{11}Li and its core ^9Li on lead near the Coulomb barrier* (Poster), [Mario Cubero](#).
- o *Observation of gamma-delayed 3alpha-break-up in ^{12}C* (Oral contribution), [Olof Tengblad](#).

International Nuclear Physics Conference (INPC) 2010, University of British Columbia, Vancouver (Canada), 4-9th of July 2010.

- o *Evidence for reduced collectivity around mid-shell in semi-magic Sn isotopes from new lifetime measurements* (Oral contribution), [Andrea Jungclauss](#).

8th Conference on Cryocrystals and Quantum Crystals (CC 2010), Moscow (Russia), 25-31th of July 2010.

- o *Metastable defect structure in orientational ordered crystal of ethanol* (Poster), [A.I. Krivchikov](#), O.A. Korolyuk, F.J. Bermejo, C. Cabrillo and A.C. Hannon.

Frontiers in Nuclear Structure, Astrophysics and Reactions (FINUSTAR 3, 2010), Rhodes (Greece), 23-27th of August 2010.

- o *Scattering studies of the halo nucleus ^{11}Li and its core ^9Li on ^{208}Pb near the Coulomb barrier* (Poster), [Mario Cubero](#).
- o *^{12}C formation: A classical quest in new Light* (Oral contribution), [Olof Tengblad](#).

Euroschool on Exotic Beams 2010, Santiago de Compostela (Spain), 4-10th of September 2010.

- o *Dynamic studies of ^{11}Li and its core ^9Li on lead near the Coulomb barrier* (Poster), [Mario Cubero](#).

NUSTAR (Nuclear Structure, Astrophysics and Reactions) Week, Lund (Sweden), 5-8th of October 2010.

- o *R3B Simulation for CALIFA in phoswich configuration*. (Oral contribution), [Ángel Perea](#), [José Sánchez del Río](#) and [Olof Tengblad](#).

Future Physics Workshops, Jyväskylä (Finland), 15-16th of November 2010.

- o *Beta delayed Multi particle break-up studies; technical evolution* (Oral contribution), [Olof Tengblad](#).

ISOLDE Workshop and User Meeting 2010, CERN, Geneva (Switzerland), 8-10th of December 2010.

- o *Single-particle states in ^{79}Zn and the $N=50$ shell gap near ^{78}Ni* , (Oral contribution), [Riccardo Orlandi](#).

R3B Collaboration Meeting on Technical Issues, Darmstadt (Germany), 14-16th of December 2010.

- o *CALIFA Endcap Status Report* (Oral contribution), [Enrique Nacher González](#).
- o *R3B end cap for CALIFA* (Oral contribution), [J.A. Vilan](#), [H. Álvarez](#), [M. Gascon](#), [B. Jakobsson](#), [Olof Tengblad](#), [T. Nilsson](#), [I. Durán](#), [R. Gernhauser](#), [D. Cortina](#), [José Sánchez del Río](#) y [Ángel Perea](#).
- o *Status on Phoswich Solutions* (Oral contribution), [Ángel Perea](#), [Enrique Nacher](#), [José Sánchez del Río](#), [Guillermo Ribeiro](#) and [Olof Tengblad](#).

4.2.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS

SPIE Photonics West 2010, Plasmonics in Biology and Medicine VII, San Francisco (USA), 23-28th of January 2010.

- o *Ultrathin silver coated gold nanoparticles in solution as suitable substrates for surface-enhanced Raman scattering* (Poster), [C. Domingo](#), L. Guerrini, J.V. García-Ramos, S. Sánchez-Cortés.
(Together with EVPM)
- o *SERS+MEF of the anti tumoral drug emodin adsorbed on silver nanoparticles* (Poster), [P. Sevilla](#), R. de Llanos, C. Domingo, J.V. García-Ramos, S. Sánchez-Cortés.
(Together with EVPM)

COST D42 WG2 Meeting, Madrid (Spain), 11-12th of March 2010.

- o *Raman techniques applied to Cultural Heritage objects* (Invited talk), [C. Domingo](#).

European Geosciences Union (EGU), Vienna, Austria, 2-7th of May 2010.

- o *Infrared spectra of water-ammonium ices. The elusive 6.8 μm band* (poster), O. Gálvez, B. Maté, V.J. Herrero, D. Fernández-Torre, M.A. Moreno and R. Escibano.
- o *A study of $\text{CH}_4/\text{H}_2\text{O}$ ices by infrared spectroscopy* (poster), Víctor J. Herrero, Rafael Escibano, Óscar Gálvez, Belén Maté and Miguel. A. Moreno.
- o *$\text{HNO}_3/\text{HCl}/\text{H}_2\text{O}$ clusters: prediction of spectra* (poster), Rafael Escibano, Oscar Gálvez, Cristina Puzzarini, Rafael G. Mosteo and Pedro Gómez.
- o *Quantum chemical investigation on the catalytic mechanism of vanadium iodoperoxidase and the iodination of common organic compounds*, (poster), Oscar Gálvez and Luis F. Pacios.

41st Annual Meeting of the APS Division of Atomic, Molecular and Optical Physics, Houston, Texas (USA), 25-29th of May 2010.

- o *Supersonic expansions of Molecular Oxygen* (Poster), J. Pérez-Ríos, M. I. Hernández, G. Tejeda, S. Montero.

20th International Conference on Spectral Line Shapes, St. Johns (Canada), 6-11th of June 2010.

- o *Experimental Determination of Rotational State-to-State Collisional Relaxation Rates by Raman-Raman Double Resonance. Application to Self-Collisions in Acetylene* (Invited Talk), R. Z. Martínez, J. L. Doménech and D. Bermejo.

International Polar Year Oslo Science Conference, Oslo, Noruega. 8-12th of June 2010.

- o *Theoretical Investigation on the Catalytic Mechanism of Iodine Release to the Atmosphere and Iodination of Relevant Organic Compounds*, (poster), Oscar Gálvez and Luis F. Pacios.

Quantum Effects in Biological Systems QuEBS2010, U. Harvard, Cambridge (USA), 17-20th of June 2010.

- o *Efficiency of excitonic energy transfer and trapping in photosynthetic systems* (Poster contribution), C. Kreisbeck, T. Kramer, Mirta Rodríguez, B. Hein.

9th European Conference on non linear Spectroscopy and 29th European CARS workshop, Bremen, Germany 21-23rd of June 2010.

- o *Determination of State-to-state relaxation coefficients by stimulated Raman double resonanace. Acetylene.* (Poster), Dionisio Bermejo, José-Luis Doménech et Raúl-Zósimo Martínez.

65th OSU International Symposium on Molecular Spectroscopy. Columbus, OH (USA), 21-25th of June 2010.

- o *Time-Resolved Rotational Energy Transfer And Spectral Line Broadening In Acetylene. A High Resolution Raman Study (Oral presentation).* José L. Doménech, Raúl Z. Martínez and D. Bermejo.

PAMO (Physique Atomique moleculaire et Optique) et JSM (Journées de Spectroscopie Moléculaire), Orsay, France, 29th of June – 2nd of July 2010.

- o *Determination of of rotational state-to-state relaxation coefficients by stimulated Raman double resonance. Acetylene (Poster).* Dionisio Bermejo, José-Luis Doménech et Raúl-Zósimo Martínez.

International Meeting on Atomic and Molecular Physics and Chemistry IMAMPC 2010, Madrid (Spain), 29th of June – 2nd of July 2010.

- o *Periodic driving of ultracold atoms in optical lattices (Invited talk)*, Mirta Rodríguez.
- o *Stimulated Raman spectroscopy for the study of collisional energy transfer: Determination of rotational state-to-state relaxation rates in acetylene (Invited talk)*, R. Z. Martínez, J. L. Doménech and D. Bermejo.

10th European Conference on Atoms Molecules and Photons (ECAMP 10), Salamanca, 4-9th of July, 2010.

- o *Spectral Line Broadening And Time-Resolved Rotational Energy Transfer In Acetylene: A High Resolution Raman Study* (Poster) J.-L. Doménech, R.-Z. Martínez and D. Bermejo.
- o *The photodissociation of CH_3I in the edges of the A band: Comparison between slice imaging experiments and multisurface wavepacket calculations* (Poster) M. González, L. Rubio-Lago, J. Rodríguez, A. García-Vela, A. Arregui, G. A. Amaral, and L. Bañares.
- o *Molecular collisions in jets by Raman spectroscopy* (Poster), J. M. Fernández, G. Tejeda, S. Montero.
- o *Statistical vs Dynamicl Effects in the $\text{H}^+ + \text{D}_2$ and $\text{D}^+ + \text{H}_2$ reations* (Poster), P. G. Jambrina, J. M. Alvarino, V. J. Herrero, V. Sáez Rábanos, M. Hankel, F. J. Aoiz, and D. Gerlich.
- o *Harmonic generation in CaF_2 plumes* (Poster), R. de Nalda, M. López-Arias, M. Oujja, R. Torres, J. Marangos, and M. Castillejo.
- o *Collisions of molecular oxygen in supersonic jets* (Poster), J. Pérez-Ríos, M. Bartolomei, J. Campos-Martínez, M. I. Hernández, G. Tejeda, J. M. Fernández, S. Montero.

- o *The radical channel in acetaldehyde: simultaneous pathways on S_0 and T_1 States* (poster) J. Rodríguez, G. A. Amaral, A. Arregui, L. Rubio-Lago, and L. Bañares.
- o *The molecular channel in the photodissociation of acetaldehyde: The importance of the roaming mechanism.* (Poster) J. Rodríguez, G. A. Amaral, A. Arregui, L. Rubio-Lago, and L. Bañares.
- o *Study of the photodissociation dynamics of pyrrole-ammonia clusters by velocity map imaging* (poster) L. Rubio-Lago, J. Rodríguez, M. González, G. a. Amaral, and L. Bañares.
- o *Femtosecond Laser Ablation and Pulsed Laser Deposition of CdS and ZnS*, (Poster) M. Sanz, M. López-Arias, R. de Nalda, M. Castillejo, S. Amoroso, G. Ausanio, R. Bruzzese, and X. Wang.

27th International Symposium on Rarified Gas Dynamics (27RGD), Pacific Grove, California (USA), 10-15th of July 2010.

- o *Condensation of Hydrogen and Deuterium in supersonic jets* (Oral communication), J. H. Morilla, J. M. Fernández, G. Tejeda, S. Montero.
- o *Supersonic jets of N_2+H_2 mixtures* (Poster), A. Ramos, G. Tejeda, J. M. Fernández, S. Montero.

20th European Conference on the Atomic and Molecular Physics of Ionised Gases (19th ESCAMPIG), Novy Sad, Serbia, 12-17th of July 2010.

- o *Large effects of small pressure changes in the kinetics of low pressure glow discharges (invited talk)*, Isabel Tanarro and Víctor J. Herrero.

XXII International Conference on Raman Spectroscopy (ICORS10), Boston, USA, 8-13th of August 2010.

- o *SERS of Insoluble Synthetic Organic Pigments Employing Calixarenes as Dispersive Cavitands: Application to Quinacridone Quinone* (Invited talk), C. Domingo, E. del Puerto, S. Sanchez-Cortes, J.V. García-Ramos.
(Together with EVPM)
- o *Vibrational Characterization and Surface-Enhanced Raman Scattering Detection of Beta-Agonists used in Sport Doping* (Oral), S. Sanchez-Cortes, I. Izquierdo-Lorenzo, J. V. García-Ramos, C. Domingo.
(Together with EVPM)

30th European Congress on Molecular Spectroscopy (EUCMOS 2010), Firenze (Italy), 29th of August – 3rd of September 2010.

- o *New approaches in metal enhanced spectroscopy (SERS and SEF) in solution: Detection of insoluble compounds and pharmaceutical drugs* (Plenary Lecture), J.V. García-Ramos, P. Sevilla, E. del Puerto, R. de Llanos, I. Izquierdo, S. Sanchez-Cortes, C. Domingo.
(Together with EVPM)

XVIII European Conference on Dynamics of Molecular Systems (MOLEC 2010), Curia/Anadia (Portugal), 5-10th of September 2010.

- o *Inelastic collisions: Close coupling calculations versus experiment* (Invited talk), S. Montero.
- o *Ions in astronomical ices* (invited talk), V. J. Herrero, B. Maté, O. Gálvez, D. Fernández-Torre, M. A. Moreno, and R. Escribano.
- o *Dynamics of the H_3^+ system: Comparison between theory and experiments* (poster), P. G. Jambrina, J. M. Alvaríño, V. J. Herrero, V. Sáez Rábanos, M. Hankel, F. J. Aoiz, and D. Gerlich.

VI Congreso Ibérico de Espectroscopía - XXII Reunión Nacional de Espectroscopía (VI CIE - XXII RNE), Porto (Portugal), 8-10th of September 2010.

- o *Ammonium and formate ions in astrophysical ices* (Poster). B. Maté, O. Gálvez, V. J. Herrero and R. Escribano.
- o *Surface-Enhanced Raman Scattering of Quinacridone Quinone pigment employing Calixarenes as dispersive cavitands* (Poster), E. del Puerto, S. Sanchez-Cortes, J.V. García-Ramos, C. Domingo.
(Together with EVPM).
- o *Vibrational Characterization and Surface-Enhanced Raman Scattering Detection of Beta-Agonists used in Sport Doping* (Oral communication), S. Sanchez-Cortes, I. Izquierdo-Lorenzo, J. V. García-Ramos, C. Domingo.
(Together with EVPM).

11th European Vacuum Conference ECV-11 & 8th Iberian Vacuum Meeting, IVM-8 & 6th European Topical Conference on Hard Coatings, Salamanca, 13-17th of September 2010.

- o *Cold Plasma Chemistry and Diagnosis* (invited talk), Isabel Tanarro and Víctor. J. Herrero.
- o *Diagnostics and modelling of low pressure glow discharges of hydrogen and deuterium mixtures* (oral presentation) Miguel Jiménez-Redondo, Esther Carrasco, Víctor J. Herrero and Isabel Tanarro.
- o *Chairperson of session "Surface pretreatments"*, I. Tanarro.

o Chairperson of session “Bi- and ternary hard coatings”, V. J. Herrero.

23rd IAEA Fusion Energy Conference, Daejeon, Korea, 11-16th of October 2010.

o ***Towards an integrated scenario for tritium inventory control during ITER operation under carbon PFCs by nitrogen based chemistry.*** (poster), F. L. Tabarés, J.A. Ferreira, D. Tafalla, A. Ramos, D. Alegre, I. Tanarro, V. Herrero, C. Gomez-Alexandre, G. van Rooj, J. Westerhout, R. Al, J. Rapp, A. Drenik, M. Mozetic.

15th European Summer School “Low Temperature Plasma Physics: Basics and Applications”, Bad Honnef, Germany 9-14th of October 2010.

o *Low Pressure Glow Discharges of H₂ and D₂ mixtures: neutral and ion chemistry* (Poster), E. Carrasco, M. Jiménez-Redondo, V. J. Herrero, and I. Tanarro.

Rencontre International de Spectroscopie et Optique (RISO 2010), Errachidia (Marruecos), 15-16th of October 2010.

o *Surface-Enhanced Raman Spectroscopy as a molecular chemosensing technique for Artworks diagnosis* (Invited Plenary Lecture), S. Sanchez-Cortes, C. Domingo, Z. Jurasekova, M. V. Cañamares, E. del Puerto, J.V. García-Ramos.
(Together with EVPM)

COST D42- Final Meeting, Dublin (Ireland), 8-9th of November 2010.

o *Lasers in Conservation of Artworks: Analysis and Diagnosis* (Poster), M. Castillejo, C. Domingo, M. Ouja, C. Sistach.

American Geophysical Union (AGU), San Francisco (USA), 13-17th of December 2010.

o *D/H enrichment at astrophysically-relevant temperatures* (poster), Rafael Escribano, Óscar Gálvez, Belén Maté Miguel Angel Moreno and Víctor J. Herrero.

New trends in Quantum Information and Quantum Optics, S. Benet (Spain), 14-17th of December 2010.

o *Controlled directed particle current despite time-reversal symmetry* (Poster contribution), J. Santos. R. Molina, J. Ortigoso, M. Rodríguez.

4.2.4 DPTO. DE ESPECTROSCOPIA VIBRACIONAL Y PROCESOS MULTIFOTÓNICOS / VIBRATIONAL SPECTROSCOPY AND MULTIPHOTON PROCESSES

SPIE Photonics West 2010, Plasmonics in Biology and Medicine VII, San Francisco (USA), 23-28th of January 2010.

o *Ultrathin silver coated gold nanoparticles in solution as suitable substrates for surface-enhanced Raman scattering* (Poster), C. Domingo, L. Guerrini, J.V. García-Ramos, S. Sanchez-Cortes.
(Together with FM).
o *SERS+MEF of the anti tumoral drug emodin adsorbed on silver nanoparticles* (Poster), P. Sevilla, R. de Llanos, C. Domingo, J.V. García-Ramos, S. Sánchez-Cortés.
(Together with FM).

10th Physics of Light-Matter Coupling in Nanostructures, Cuernavaca (México), 12-18th of April 2010.

o *Plasmonic nanostars: Stochastic optimization of resonant properties* (Oral Communication), A. Tassadit, D. Macías, J. A. Sánchez-Gil, P.-M. Adam.

8th International Symposium on the Conservation of Monuments in the Mediterranean Basin, Patras (Grecia), 31st of May-2nd of June 2010.

o *Consolidation of Carbonate Stones with Nanoparticles* (Oral contribution), M^a Paula López-Arce, Luz Stella Gómez-Villalba, Mónica Álvarez del Buego, Rafael Fort, Sagrario Martínez-Ramírez and Elena Bailo.

XXII International Conference on Raman Spectroscopy, Boston (USA), 8-13th August 2010.

o *SERS of insoluble Synthetic Organic Pigments employing Calixarenes as dispersive Cavities: Application to Quinacridone Quinone* (Invited Lecture), C. Domingo, E. del Puerto, S. Sánchez-Cortes, J. V. García-Ramos.

(Together with FM).

- o *Vibrational Characterization and Surface-Enhanced Raman Scattering Detection of Beta-Agonists used in Sport Doping* (Oral Communication), S. Sanchez-Cortes, I. Izquierdo-Lorenzo, C. Domingo, J. V. García-Ramos.

(Together with FM).

XXX European Conference on Molecular Spectroscopy (XXX EUCMOS), Florencia (Italy), 29th August-3rd of September 2010

- o *New approaches in Metal Enhanced Spectroscopy (SERS and SEF) in solution: Detection of insoluble compounds and pharmaceutical drugs* (Plenary Lecture), J.V. García-Ramos, P. Sevilla, E. del Puerto, R. de Llanos, I. Izquierdo-Lorenzo, S. Sánchez-Cortés, C. Domingo.

(Together with FM).

- o *Synthesis, conformational and pharmacological study of some carbamates derived from endo-8-methyl-8-azabicyclo[3.2.1]octan-3 α -ol-hydrochlorides* (Poster), I. Iriepa, J. Bellanato, and E. Gálvez.

XXII Reunión Nacional de Espectroscopía. VI Congreso Ibérico de Espectroscopía. Oporto (Portugal) 8-10th of September 2010.

- o *Time-resolved optical emission spectroscopy study of laser-ablation of Germanium targets* (Poster), L. Díaz, M. Santos J. J. Camacho, J.M.L. Poyato.
- o *Temporal characterization of CO₂ plasma induced by a higpower TEA- CO₂ pulsed laser* (Poster), J. J. Camacho, L. Díaz, M. Santos, J.P. Cid, E. Martín, J.M.L. Poyato.
- o *Study of protein-nucleic acid interactions in hepatitis C virus using FTIR spectroscopy* (Poster), P. Carmona, A. Rodríguez-Casado and M. Molina.
- o *Vibrational Characterization and Surface-Enhanced Raman Scattering Detection of Beta-Agonists used in Sport Doping* (Oral Communication), I. Izquierdo-Lorenzo, S. Sanchez-Cortes, J. V. García-Ramos, C. Domingo.

(Together with FM)

- o *Characterization by Raman spectroscopy of a type of cement admixtures called Superplastizers* (Poster), M. V. Cañamares, A. Crespo, S. Sanchez-Cortes and S. Martínez Ramírez.
- o *Espectroscopía SERS aplicada a la detección de multicomponentes en una muestra* (Poster), I. López-Tocón, J. C. Otero, J. F. Arenas, J. V. Garcia-Ramos y S. Sanchez-Cortes.
- o *Surface-Enhanced Raman Scattering of Quinacridone Quinone pigment employing Calixarenes as dispersive cavitands* (Poster), E. del Puerto, S. Sanchez-Cortes, J. V. Garcia-Ramos and C. Domingo.

(Together with FM)

- o *Synthesis of magnetic nanoparticles with plasmonic properties. Applications in surface-enhanced Raman scattering* (Poster), A. García-Leis and S. Sanchez-Cortes.
- o *Surface Enhanced Raman Scattering of humic acids on nanostructured Ag-Electrode* (Poster), M. L. Roldán and S. Sanchez-Cortes.
- o *Surface Enhanced Spectroscopy of an antiinflammatory drug piroxicam* (Poster), R. de Llanos, P. Sevilla, S. Sanchez-Cortes and J. V. García-Ramos.
- o *Surface integral formulation for light scattering from 3D objects: surface plasmon resonances in metallic nanoantennas* (Poster), R. Rodríguez-Oliveros and J. A. Sánchez-Gil.
- o *Enhanced backscattering of light from randomly rough gratings on negative magnetic meta-materials* (Poster), R. Paniagua-Domínguez, J. A. Sánchez-Gil, P. Albella, J. M. Sáiz, F. González, and F. Moreno.

4th International Congress on Advanced Electromagnetic Materials in Microwaves and Optics (METAMATERIALS 2010), Karlsruhe (Alemania), 13-17th of September 2010.

- o *Plasmon optical nanoantennas: Characterization (3D), design, and applications in metamaterials* (Oral Communication), R. Rodríguez-Oliveros, R. Paniagua, J. A. Sánchez-Gil, V. Giannini, D. Macías, and J. Gómez Rivas.
- o *Enhanced backscattering of light from randomly rough gratings on negative magnetic metamaterials* (Poster), R. Paniagua-Domínguez, J. A. Sánchez-Gil, P. Albella, J. M. Sáiz, F. González, and F. Moreno.

Passion for Photons (DIPC10), San Sebastián (Spain), 28-30th of September 2010.

- o *Designing metal nanoantennas though bio-inspired stochastic optimization* (Poster), R. Rodríguez-Oliveros, J. A. Sánchez-Gil, A. Tassadit, P.-M. Adam, and D. Macías.

Rencontre International de Spectroscopie et Optique (RISO 2010), Errachidia (Marruecos), 15-16th of October 2010.

- o *Surface-Enhanced Raman Spectroscopy as a molecular chemosensing technique for Artworks diagnosis* (Invited Plenary Lecture), S. Sanchez-Cortes, C. Domingo, Z. Jurasekova, M. V. Cañamares, E. del Puerto, J.V. García-Ramos.

(Together with FM).

- o *Identification de Pigments et Colorants d'Ornementation dans des manuscrits anciens du Maroc par la spectroscopie optique* (Oral Communication), A. Elbakkali, S. Ait Lyazidi, M. Haddad, M. El Rhaiti, S. Sanchez-Cortes.

4.2.5 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

Users' Meeting 2010 & Associated Workshop, ESRF, Grenoble (France), 9-12th of February 2010.

- o *A microdiffraction study on the confinement effects in one-dimensional polymer arrays* (Invited lecture), Mari Cruz García-Gutiérrez.

14th Symposium Nanostructured Polymers / Nanocomposites, Martin Luther University, Halle (Germany), 18th and 19th of May 2010.

- o *Development of PET lamellae in nanolayered polymer systems and correlation with micromechanical properties* (Invited lecture), A. Flores, C. Arribas, F. Fauth, D. Khariwala, A. Hiltner, E. Baer and F.J. Baltá Calleja and F. Ania.
- o *Micromechanical characterization of polymers and nanocomposites relating to nanostructure parameters* (Invited lecture), F.J. Baltá Calleja.
- o *The doubling of longitudinal crystal size in nascent UHMWPE powder on sintering* (Invited lecture), L.P. Myasnikova, Y.M. Boiko, F.J. Baltá Calleja, E.M. Ivankova, U. Noechel, V.A. Marikhin, E.I. Radovanova, S. Goerlitz and V. Seidevitz.
- o *Micromechanical behaviour of cold-crystallized PET: Influence of re-crystallization on nanostructure and segmental relaxation in the confinement regime* (Invited lecture), M. Pieruccini, G. Di Marco, P. Calandra, A. Flores and F.J. Baltá Calleja.

Workshop on Polymer Crystallization Under Conditions Relevant to Processing, Genova (Italy), 26-29th of May 2010.

- o *Effect of nano-additives on the crystallization of polymers after shear flow* (Invited lecture), Aurora Nogales Ruiz.
- o *Structure evolution during re-crystallization of low-T cold crystallized PET: The interpretation of X-ray and DMTA data in the light of a new model for segmental relaxation* (Invited lecture), M. Pieruccini, G. Di Marco, A. Flores, U. Nöchel, N. Stribeck and F.J. Baltá Calleja.

International Meeting on Atomic and Molecular Physics and Chemistry, Madrid, 29th of June-2nd of July 2010.

- o *Simulation of folding processes of single-chain copolymers containing short chain branches* (Invited talk), J. Ramos

XII Simposio Latinoamericano de Polímeros and X Congreso Iberoamericano de Polímeros, San José (Costa Rica), 13-16th of July 2010.

- o *Computer modelling of the early crystallization process of single-chain ethylene/1-hexene copolymers from dilute solutions* (Poster), J. Ramos and J. Martínez Salazar.

6th International Conference on Broadband Dielectric Spectroscopy and its Applications, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, Madrid, 7-10th of September 2010.

- o *Confined dynamics in semicrystalline polymers: A Dielectric Spectroscopy and Neutron Spin Echo Study* (Oral contribution), A. Sanz, A. Nogales, M. Soccio, N. Lotti and T. A. Ezquerra.
- o *Effects of strain induced crystallization on the dielectric behavior of natural rubber* (Oral contribution), M. Hernández, R. Verdejo, M.A. López-Manchado and T.A. Ezquerra.
- o *Influence of fragility on polymer cold crystallization* (Poster), A. Sanz, A. Nogales, T.A. Ezquerra
- o *Origin of the β relaxation in PVDF based ferroelectric polymers. Confinement effects?* (Poster), A. Nogales, A. Sanz and T.A. Ezquerra.
- o *Influence of preparation procedure on the conductivity and transparency of SWCNT polymer nanocomposites* (Poster), J.J. Hernández, M.C. García-Gutiérrez, A. Nogales, D.R. Rueda, M. Kwiatkowska, Z. Roslaniec and T.A. Ezquerra.
- o *Restricted Segmental Relaxation in Oriented Semicrystalline Poly(vinylidene fluoride) as Revealed by Broad Band Dielectric Spectroscopy* (Poster), A. Linares, A. Nogales, A. Sanz, T.A. Ezquerra and M. Pieruccini.
- o *Phase behaviour and dynamics in a symmetric Polystyrene-block-Poly(ethyl methacrylate) Copolymer* (Poster), A. Sanz, D. R. Rueda, T. A. Ezquerra and A. Nogales.
- o *Influence of the Crystalline Structure in the Segmental Mobility of Semicrystalline Polymers:*

Poly(triethylene terephthalate) (Poster), I. Martín-Fabiani, A. Linares, A. Sanz, A. Nogales and T.A. Ezquerra.

- o *Segmental dynamics of semicrystalline poly(vinylidene fluoride) nanorods* (Poster), J. Martín, C. Mijangos, A. Sanz, T. A. Ezquerra and A. Nogales.
- o *Multiple phase diagram in supercooled ethanol studied by Simultaneous Dielectric Spectroscopy and Neutron Diffraction* (Poster), A. Sanz, I. Puente-Orench, M. Jiménez-Ruiz, A. Nogales and T. A. Ezquerra.
- o *Study of the Electrical Conductivity of Polyamide 66 and Carbon Nanofibers Composites by Dielectric Spectroscopy* (Poster), J.C. Canalda, A. Linares, M.E. Cagiao and T.A. Ezquerra.

4th Conference on Polymer Behavior – IUPAC, Lodz (Poland), 20-23rd of September 2010.

- o *Nanostructure and crystallization phenomena of nanolayered crystalline polymer system using synchrotron radiation techniques and indentation methods* (Plenary lecture), F.J. Baltá Calleja and F. Ania.
- o (Member of the International Scientific Committee), F.J. Baltá Calleja.

4th Meeting on High Performance Computing in Molecular Simulations, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 30th of September- 1st of October 2010.

- o *Simulations of the crystalization process of single chain copolymers from dilute solutions* (Poster), S. Sanmartín Sánchez, J. Ramos, J. Martínez-Salazar.

3rd International Conference on Polyolefin Characterization (ICPC), Shanghai (China), 8-10th of November 2010.

- o *Following the Crystallization Process of Polyethylene Single Chain by Molecular Dynamics: The Role of Lateral Chain Defects* (Invited lecture), S. Sanmartín, J. Ramos and J. Martínez-Salazar.
- o *Molecular Rheology of Model Ethylene/Styrene Copolymers* (Poster), J.F. Vega, M.T. Expósito and J. Martínez-Salazar.

4.3. ESTANCIAS DE INVESTIGADORES EN EL INSTITUTO / VISITORS

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

- ❖ **Prof. Juan Antonio Caballero**, Universidad de Sevilla, 4-7th of May 2010.
- ❖ **Prof. Jerónimo Cortez Quezada**, Facultad de Ciencias-UNAM, Mexico D.F., Mexico, 16th-22nd of October 2010.
- ❖ **Prof. Thomas Williams Donnelly**, Massachusetts Institute of Technology, Cambridge Ma., USA, 28th of April-15th of May 2010.
- ❖ **Prof. Stephane Goriely**, University Libre of Brussels, Belgium, 15-16th of April 2010.
- ❖ **Prof. Gerardo Ortiz**, University of Indiana (USA), 4-10th July 2010.
- ❖ **Prof. Gustavo E. Scuseria**, Rice University, Houston (USA). 24-29th September 2010.
- ❖ **Prof. Chopin Soo**, National Cheng Kung University, Tainan, Taiwan, 4th-17th of September 2010.
- ❖ **Prof. Chavdar Stoyanov**, Bulgarian Academy of Sciences, Sofia, Bulgaria, 10-11th of February 2010.
- ❖ **Prof. Pieter Van Isacker**, Grand Accelérateur National d'Ions Lourds, CEA/DSM-CNRS/IN2P3, Caen, France, 25-27th February 2010.
- ❖ **Prof. Madhavan Varadarajan**, Raman Research Institute, Bangalore, India, 22nd of February-10th of March 2010.
- ❖ **Prof. María Villa Villa**, Universidad Autónoma Metropolitana, Mexico, 4th-17th of September 2010.
- ❖ **Prof. Hoi-Lai Yu**, Academia Sinica, Nankang-Taipei, Taiwan, 11th-23rd of September 2010.
- ❖ **Dr. Miguel A. Cazalilla**, Centro de Física de Materiales, CSIC. San Sebastian (Spain). 4-5th of November 2010.
- ❖ **Dr. Daniele Colosi**, Instituto de Matemáticas (Unidad de Morelia)-UNAM. Morelia, Mexico, 20th-30th of March 2010.
- ❖ **Dr. Thomas Duguet**, CEA Saclay, France, 10-12th of November 2010
- ❖ **Dr. Antonio García-García**, Instituto Superior Técnico, Universidad Técnica de Lisboa (Portugal), 17-22th March 2010
- ❖ **Dr. Florian Girelli**, School of Physics, The University of Sydney, Australia, 13th-15th of December 2010.
- ❖ **Dr. Sergio Lerma**, Universidad Veracruzana, Xalapa (México), 26th August- 7th September 2010.
- ❖ **Dr. Hanno Sahlmann**, Karlsruhe University, Karlsruhe, Germany, 13th-16th of July 2010.
- ❖ **Dr. Pavel Stransky**, Universidad Nacional Autónoma de México, 20-23th of April 2010.

- ❖ **Dr. Dietmar Weinmann**, CNRS, Strasbourg, France, 6-10th of December 2010.
- ❖ **Vicent Brites**, Paris-Est University, France, 1th of February – 31st of March 2010.
- ❖ **Jonathan Hackett**, Perimeter Institute for Theoretical Physics, Ontario, Canada, 21st-27th of November 2010.
- ❖ **Edward Wilson-Ewing**, Penn State University, University Park (PA), USA, 15th of February-12th of March 2010.

4.3.2 DPTO. DE FÍSICA NUCLEAR Y FÍSICA ESTADÍSTICA / NUCLEAR PHYSICS AND STATISTICAL PHYSICS

- ❖ **Prof. Guiseppe Cardella**, LNS- INFN, Catania, Italy, 10-13th of May 2010.
- ❖ **Prof. Felix Fernández-Alonso**, ISIS Pulsed Neutron and Muon Source, U. K., 14-24th of November 2010.
- ❖ **Dra. Anna Corsi**, Università degli Studi di Milano, Milano, Italy, 24-26th of October 2010.
- ❖ **Dr. Daniel Galaviz**, Centro de Física Nuclear de la Universidad de Lisboa, Portugal, 8-10th of March 2010.

4.3.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS

- ❖ **Prof. Miguel Carvajal Zaera**, Universidad de Huelva, 27-29th of January 2010.
- ❖ **Prof. Robert E. Grisenti**, J. W. Goethe Universität Frankfurt-am-Main, Germany, May-June 2010.
- ❖ **Dr. Birgit Hein**, Universitaet Regensburg, Germany, 12-24th of September 2010.
- ❖ **Dr. Tobias Kramer**, Universitaet Regensburg, Germany, 12-24th of September 2010.
- ❖ **Ruzin Aganoglu**, Freie Universitaet Berlin, Germany, 28-29th of June 2010.
- ❖ **Cristoph Kreisbeck**, Universitaet Regensburg, Germany, 12-24th of September 2010.
- ❖ **D./Mr. Matthias Kühnel**, J. W. Goethe Universität Frankfurt-am-Main, Germany, May-June, and 7-15th of December 2010.

4.3.4 DPTO. DE ESPECTROSCOPIA VIBRACIONAL Y PROCESOS MULTIFOTÓNICOS / VIBRATIONAL SPECTROSCOPY AND MULTIPHOTON PROCESSES

- ❖ **Prof. Saadia Ait Lyazidi**, LASMAR, Université Moulay Ismail, Meknes, Marruecos, 1-13th Noviembre.
- ❖ **Dr. Pierre-Michel Adam**, Laboratoire de Nanotechnologie et d'Instrumentation Optique (LNIO-ICD), Université de Technologie de Troyes (France), 18-22th April.
- ❖ **Dr. Tomas Krenek**, Postdoctoral fellow, Laboratory of Laser Chemistry, Institute of Chemical Process Fundamentals, A.S.C.R., Prague (Czech Republic), 17-28th Noviembre.
- ❖ **Dr. Demetrio Macías**, Laboratoire de Nanotechnologie et d'Instrumentation Optique (LNIO-ICD), Université de Technologie de Troyes (France), 18-22th April.
- ❖ **Dra. Lorena Roldán**, Universidad Nacional de Tucumán, San Miguel de Tucumán (Argentina), 1st January- 31st December.
- ❖ **Ldo. José Cárcamo**, Facultad de Ciencias, Universidad de Chile, Santiago (Chile), 3rd September-3rd December.
- ❖ **Lda. Ana Crespo**, Universidad Complutense, Madrid, Spain, 1st June-30th September 2010.
- ❖ **Lda. Adianez García Leis**, Instituto Superior de Tecnologías y Ciencias Aplicadas (Cuba), 1st January- 8th October.

4.3.5 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

- ❖ **Prof. Djafer Benachour**, LMPMP, Faculty of Engineering, Ferhat Abbas University, Sétif, Algeria, 30th of May-2nd of June and 30th of November-11th of December 2010.
- ❖ **Dr. Said Bouhelal**, LMPMP, Faculty of Engineering, Ferhat Abbas University, Sétif, Algeria, 26th of January-11th of February; 6th of May-15th of July; 16-30th of September and 2-16th of December 2010.
- ❖ **Dña. Loyda Albañil Sánchez**, Universidad Nacional Autónoma de México, México, 27th of January-26th of April 2010.
- ❖ **Dña. Maraolina Domínguez Díez**, Universidad Nacional Autónoma de México, México, 27th of January-26th of April 2010.

4.4. CONFERENCIAS DE INVESTIGADORES INVITADOS / INVITED CONFERENCES

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

Prof. Víctor Aldaya.

Instituto de Astrofísica de Andalucía (CSIC), Granada.

A Quantizable Model of Massive Gauge Vector Bosons without Higgs.

11th of March 2010.

Prof. Jerónimo A. Cortez.

Facultad de Ciencias, UNAM, Mexico D.F. (Mexico).

Sobre la ambigüedad en la cuantización de teorías de campo.

20th of October 2010.

Prof. Chopin Soo.

National Cheng Kung University, Tainan (Taiwan).

New Formulation of Horava Gravity.

15th of September 2010.

Prof. Hoi-Lai Yu.

Academia Sinica, Nankang-Taipei (Taiwan).

Quasi-Local Energy Flux through the Cosmological Dynamical Horizons.

22nd of September 2010.

Dr. Iñaki Garay.

University of Erlangen-Nürnberg, Germany.

Dynamics for a 2-Vertex Quantum Gravity Model.

19th of May 2010.

Dr. Florian Girelli.

School of Physics, The University of Sydney (Australia).

Diffeomorphism Symmetry in Group Field Theories.

14th of December 2010.

Dr. Gil Jannes.

Université de Nice Sophia Antipolis, Nice (France).

Horizon Effects for Surface Waves: Wave Channels and Circular Jumps.

2nd of November 2010.

Dr. Christian Luebbe.

Conformal Geometry in GR: Dealing with Initial Singularities and Stability Questions.

23rd of April 2010.

Dr. Carlos F. Sopuerta.

Instituto de Ciencias del Espacio (CSIC), Barcelona.

Theoretical Challenges in Low Frequency Gravitational Wave Astronomy.

25th of February 2010.

Dr. Madhavan Varadarajan.

Raman Research Institute, Bangalore (India).

The Free Polymer Quantum Scalar Field and its Classical Limit.

24th of February 2010.

Jonathan Hackett.

Perimeter Institute for Theoretical Physics, Ontario (Canada).

Conserved Structures in States of Loop Quantum Gravity.

25th of November 2010.

Fabio Revuelta Peña.

Universidad Politécnica de Madrid, Madrid.

The Skeleton of Chaotic Eigenstates.

20th of May 2010.

Rogelio Rodríguez.

Instituto de Estructura de la Materia (CSIC).

Formalismo de matrices de transferencia aplicado a cadenas ordenadas aperiódicamente.

28th of January 2010.

Edward Wilson-Ewing.

Penn State University, University Park (USA).

The Loop Quantum Cosmology of Bianchi Type I and Type II Models.

18th of February 2010.

Chavdar Stoyanov.

Bulgarian Academy of Sciences, Sofia (Bulgaria).

Nuclear Structure calculations at large domain of excitation energy.

2nd of February 2010.

Thomas Duguet.

CEA-Saclay, Service de Physique Nucleaire (France).

Selfconsistent Green's function approach to finite nuclei in a Gorkov scheme with low-momentum interactions.

11th of November 2010.

Germán Sierra.

Instituto de Física Teórica, CSIC-UAM (Spain).

An exactly solvable pairing model with $p + i p$ wave symmetry.

12th of March 2010.

Antonio García-García.

Universidade de Lisboa (Portugal).

Finite size effects in superconducting grains: theory and experiments.

18th of March 2010.

Pavel Stransky.

Universidad Nacional Autónoma de México.

Manifestations of Chaos in simple Hamiltonian systems.

22th of April 2010.

Gerardo Ortiz.

University of Indiana (USA).

Dynamical critical scaling in finite-order quantum phase transitions.

5th of July 2010.

Miguel Angel Cazalilla.

Centro de Física de Materiales, CSIC. San Sebastian (Spain).

Quantum quenches in simple one-dimensional models.

5th of November 2010.

Dietmar Weinmann.

Institute de Physique et Chimie de Matériaux, Strasbourg (France).

What is Measured in the Scanning Gate Microscopy of a Quantum Point Contact?

10th of December 2010.

International Loop Quantum Gravity Seminars:

(By phone conference, together with 13 other international centers).

Prof. Abhay Ashtekar.

Penn State University, University Park (USA).

Quantum Evaporation of 2-d Black Holes.

21st of September 2010.

Prof. Jerzy Lewandowski.

Warsaw University (Poland).

New Results: Operator Spin Foams, $SL(2, C)$.

2nd of November 2010.

Prof. Alejandro Pérez.

CPT-Marseille (France).

Black Hole Entropy: An $SU(2)$ Gauge Invariant Treatment.

4th of May 2010.

Prof. Madhavan Varadarajan.

Raman research Institute, Bangalore (India).

LQG Dynamics: Insights from Parameterized Field Theory.

16th of November 2010.

Prof. José Antonio Zapata.

UNAM-Morelia (Mexico).

Curvature.

20th of April 2010.

Dr. Benjamin Bahr.

Albert Einstein Institute, Golm (Germany).

Reparametrization Invariance in Discrete Gravity.

23rd of March 2010.

Dr. Eugenio Bianchi.

CPT-Marseille (France).

The Cosmological Constant (Non-)Problem.

19th of October 2010.

Dr. Florian Conradi.

Perimeter Institute, Waterloo (Canada).

Spin Foams with Timelike Surfaces.

6th of April 2010.

Dr. Claudio Perini.

CPT-Marseille (France).

Coherent Spin Networks.

2nd of February 2010.

Dr. Fethi Ramazanoglu.

Princeton University (USA).

Information Loss in the CGHS Model.

9th of March 2010.

David Sloan.

Penn State University, University Park (USA).

Slow Roll Inflation in LQG.

19th of January 2010.

Matteo Smerlak.

ENS Lyon (France).

Bubble Divergences in State-Sum Models.

30th of November 2010.

4.4.2 DPTO. DE FÍSICA NUCLEAR Y FÍSICA ESTADÍSTICA / NUCLEAR PHYSICS AND STATISTICAL PHYSICS

Prof. Guiseppe Cardella.

LNS- INFN, Catania, (Italy).

Radioactive beams at LNS: Results and Perspectives.

10-13th of May 2010.

Dra. Anna Corsi.

Università degli Studi di Milano, Milano (Italy).

Nuclear Collective Modes as a probe of Nuclear Structure and Dynamics.

24-26th of October 2010.

4.4.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS

R. Aganoglu.

Freie Universität Berlin (Germany).

Controlling the photoassociation of ultracold molecules.

28th of June 2010.

C. Kreisbeck.

Universität Regensburg (Germany).

Efficiency in energy transfer in light harvesting complexes.

15th of September 2010.

4.4.5 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

Prof. Jan K. Krüger.

Laboratoire de Physique des Matériaux, University of Luxembourg, Luxembourg.

Photons Meet Sound Waves in Soft Matter.

31st of May 2010.

Dr. Saïd Bouhelal.

LMPMP, Faculty of Engineering, Ferhat Abbas University, Sétif, Algeria.

Preparation and Properties of Reversibly Crosslinked Isotactic Polypropylene/Clay Nanocomposites.

28th of May 2010.

Dr. Juan López Valentín.

Departamento de Química y Tecnología de Elastómeros, Instituto de Ciencia y Tecnología de Polímeros, CSIC, Madrid.

RMN de bajo campo aplicado a la ciencia y tecnología de polímeros.

12th of March 2010.

4.5 VISITAS DE INVESTIGADORES A CENTROS INTERNACIONALES / VISITS TO FOREIGN INSTITUTIONS (De una semana o más / Longer than a week)

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

Jorge Dukelsky Bercovich.

- University of Indiana, USA, 9th-15th of May 2010.
- Rice University, Houston, USA. 15th-22nd of May 2010.
- Universidad de Buenos Aires, Argentina, 2nd-12th of June 2010.

Eduardo Garrido Bellido.

- Department of Physics and Astronomy, Aarhus University, Aarhus, Denmark, 24th of April to 1st of May 2010, and from 14th to 20th of November 2010.

María Luisa Senent Diez.

- Université de Paris-Est 18th-21st of May 2010.

- Observatoire de Paris-Meudon (LERMA laboratoire), 23rd-28th of May 2010.
- Universidad Autónoma Metropolitana de México, 14th of June-7th of July 2010.

Rafael Alejandro Molina Fernández.

- Universidad Benemérita de Puebla, Puebla, Mexico, 11th-27th of January 2010.
- CNRS, Strasbourg, France, 8th-12th of February 2010.
- University of Regensburg, Germany, 9th-21st of April 2010.
- University of Tokyo, Japan, 5th-14th of August 2010.
- Universidad Nacional Autónoma de México, México D.F., Mexico, 27th of September- 6th of October 2010.

R. Rodríguez-Guzmán.

- Department of Physics, University of Surrey, UK, October 2010.

Luis J. Garay.

- King's College, London (UK), Senior Visiting Researcher, until March 2010.

Javier Olmedo Nieto.

- Institute for Gravitation and the Cosmos, Penn State University, State Park (PA), USA, 12th of April-11th of June 2010.

Esther Vicente Torrico.

- Department of Biomedical Engineering. University of California in Davis, Davis, California (USA), 1st of June to 30th of September 2010.

Óscar Moreno Díaz.

- Institute for Theoretical Physics, University of Tuebingen, Tuebingen, Germany, 4th-23rd of October 2010 and 21st of November-2nd of December 2010.

4.5.2 DPTO. DE FÍSICA NUCLEAR Y FISICA ESTADÍSTICA / NUCLEAR PHYSICS AND STATISTICAL PHYSICS

Carlos Cabrillo García.

- ISIS (Pulsed Neutron and Muon Source), Oxfordshire, England, 22th of February-5th of March 2010.
- ISIS, Oxfordshire, England, 7-18th of June 2010.

Ricardo Fernández Perea.

- ISIS (Pulsed Neutron and Muon Source), Oxfordshire, England, 22th of February-5th of March 2010.
- ISIS, Oxfordshire, England, 7-18th of June 2010.

José Sánchez del Río.

- GSI (Helmholtz Centre for Heavy Ion Research), Darmstadt, Germany, 8-22nd of July 2010.
- GSI, Darmstadt, Germany, 24th of August-10th of September 2010.

Vicente Pesudo Fortes.

- GANIL (Grand Accélérateur National d'Ions Lourds), Caen, France, 13-18th of September 2010.
- ISOLDE, CERN (On-line isotope Mass Separator, European Organization for Nuclear Research), Geneva, Switzerland, 18-25th of September 2010.
- GANIL, Caen, France, 30th of September - 8th of October 2010.

José Antonio Briz Monago.

- ISOLDE, CERN, Geneva, Switzerland, 23rd of August – 1st of September 2010.

Mariano Carmona Gallardo.

- TRIUMF (Canada's National Laboratory for Particle and Nuclear Physics), Vancouver, Canada, 29th of July-2nd October 2010.

Mario Cubero Campos.

- ISOLDE, CERN, Geneva, Switzerland, 18-24th of May and 11-17th of July 2010.
- GANIL, Caen, France, 13-18th of September and 30th of October to 8th of November 2010.

Guillermo Ribeiro Jiménez.

- GSI, Darmstadt, Germany, 3-10th of September 2010.

Ángel Perea Martínez.

- GSI, Darmstadt, Germany, 4-17th of April 2010.
- GSI, Darmstadt, Germany, 8-22nd of July 2010.

4.5.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS

Salvador Montero Martín.

- Institut für Kernphysik, J.W. Goethe Universität Frankfurt-am-Main, Germany, 27th of September - 2nd of October 2010.

José M. Fernández.

- Institut für Kernphysik, J.W. Goethe Universität Frankfurt-am-Main, Germany, March 2010.
- Institut für Kernphysik, J.W. Goethe Universität Frankfurt-am-Main, Germany, 27th of September - 2nd of October 2010.

Guzmán Tejeda Gala.

- Institut für Kernphysik, J.W. Goethe Universität Frankfurt-am-Main, Germany, March 2010.
- Institut für Kernphysik, J.W. Goethe Universität Frankfurt-am-Main, Germany, 27th of September - 2nd of October 2010.

Mirta Rodríguez Pinilla

- Institute for Theoretical Physics, U. Regensburg, Germany, 13th -21st of April 2010.

Maria Encina López-Arias.

- Department of Physics, Imperial College, London (UK), September-December 2010.

4.5.4 DPTO. DE ESPECTROSCOPIA VIBRACIONAL Y PROCESOS MULTIFOTÓNICOS / VIBRATIONAL SPECTROSCOPY AND MULTIPHOTON PROCESSES

Santiago Sánchez Cortés.

- Biophysics Department, Univ. P. J. Safarik, Kosice, Slovakia, 26th of August-3rd of September and 22-29th of November 2010.
- LASMAR, Université Moulay Ismail, Meknes, Morocco, 21-27th of February and 13-21st of October 2010.
- Catalysis Research Center, Hokkaido University, Sapporo, Japan, 29 May-6 June.

Irene Izquierdo Lorenzo.

- State Key Laboratory of Physical Chemistry of Solid Surfaces, University of Xiamen, China, September-December 2010.

Raquel de Llanos.

- Department of Chemistry, Università degli Studi di Firenze, Italy, September-December 2010.

Elena del Puerto Nevado.

- Department of Chemistry & Biochemistry, University of Windsor, Canada, March-May 2010.

Rogelio Rodríguez Oliveros.

- Center for nanophotonics, FOM-Institute AMOLF and Philips Research Labs, Eindhoven, The Netherlands, February-April 2010.

4.5.5 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

M^a Esperanza Cagiao Escohotado.

- University of Sétif, Sétif, Algiers, 9-16th of November 2010.

M^a José Capitán Aranda.

- DESY/HASYLAB, Hamburg, Germany, 9-17th of May 2010.

Araceli Flores Aguilar-Amat.

- Instituto de Ciencias Físicas, Universidad Nacional Autónoma de México, Cuernavaca, Morelos, México, 12-20th of June 2010.

M^a Cruz García Gutiérrez.

- DESY/HASYLAB, Hamburg, Germany, 11-20th of November 2010.

Javier Ramos Díaz.

- COMSE Group, Department of Materials Science and Engineering, National Technical University of Athens, Greece, since 1st of November 2009 to 28th of February 2010. José Castillejo fellowship

Francisco J. Baltá Calleja.

- DESY/HASYLAB, Hamburg, Germany, 15th of April-3rd of May 2010
- University of Hamburg, Hamburg, Germany, 4-14th of May 2010.
- University of Hamburg, Hamburg, Germany, 24th of May-19th of June 2010.
- University of Hamburg, Hamburg, Germany, 24th of June-2nd of July 2010.

Jaime J. Hernández Rueda.

- Max Planck Institute for Polymer Research, Mainz, Germany, Estancias FPI, May-September 2010.

Sara Sanmartín Sánchez.

- Groupe Théorie et Simulation des Polymères, Institut Charles Sadron, Strasbourg, France, 1st September-31st of December 2010.

CAPÍTULO 5
**LABOR DOCENTE, DIFUSIÓN DE LA CIENCIA
Y OTRAS ACTIVIDADES**

CHAPTER 5
**TEACHING, OUTREACH AND OTHER
ACTIVITIES**

5.1 DOCENCIA / TEACHING

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

Pedro Sarriguren Suquilbide.

- Estructura Nuclear. Programa de Doctorado Interuniversitario de Física Nuclear. Universidad Complutense de Madrid.
4 credits.

Eduardo Garrido Bellido.

- Estructura Nuclear. Programa de Doctorado Interuniversitario de Física Nuclear. Universidad Complutense de Madrid.
4 credits.

Gonzalo J. Olmo.

- Introduction to Modified Gravity, Quantum Fields, and Inflation. Universidad de Granada, May 10th-14th of May 2010.
1.5 credits course.
- Introduction to Modified Gravity, Quantum Fields, and Inflation. Universidad de Valencia, May 26th-28th of May 2010.
1.5 credits course.

Rayner Rodríguez Guzmán.

- Estructura Nuclear. Programa de Doctorado Interuniversitario de Física Nuclear. Universidad Complutense de Madrid.
4 credits.

Javier Rodríguez Vignote.

- Laboratorio de Física General. Primer curso de la Licenciatura en Ciencias Físicas. Universidad Complutense de Madrid.
4 credits.

Pablo San José Martín.

- Simulaciones Numéricas con Mathematica. Curso del programa oficial de posgrado sobre Materiales Avanzados y Nanotecnología, Noviembre 2010. Universidad Autónoma de Madrid.
2 credits.

Luis J. Garay.

- Relatividad general avanzada y agujeros negros. Máster de Física Fundamental, Universidad Complutense de Madrid.
45 hours, 6 credits (together with Prof. F.J. Chinae and Mercedes Martín Benito).
- Mecánica Teórica. Licenciatura de CC. Físicas, Universidad Complutense de Madrid.
60 hours, 6 credits.

Elvira Moya Valgañón.

- Física Nuclear y de Partículas. Quinto curso de la Licenciatura en Ciencias Físicas y Máster en Física Fundamental, curso 2009/2010 y 2010/2011. Universidad Complutense de Madrid.
40 hours.

Óscar Moreno Díaz.

- Física Nuclear y de Partículas. Quinto curso de la Licenciatura en Ciencias Físicas y Máster en Física Fundamental, curso 2009/2010 y 2010/2011. Universidad Complutense de Madrid.
40 hours.
- Laboratorio de Física Nuclear y de Partículas. Quinto curso de la Licenciatura en Ciencias Físicas y Máster en Física Fundamental, curso 2009/2010 y 2010/2011. Universidad Complutense de Madrid.

10 hours.

- Laboratorio de Complementos de Física -Máster en Formación del Profesorado de Educación Secundaria Obligatoria y Bachillerato, curso 2009/2010 y 2010/2011.

Universidad Complutense de Madrid.

30 hours.

5.1.2 DPTO. DE FÍSICA NUCLEAR Y FÍSICA ESTADÍSTICA / NUCLEAR PHYSICS AND STATISTICAL PHYSICS

M^a José García Borge.

- Física Nuclear Experimental Avanzada -Doctorado de Física Atómica, Molecular y Nuclear-. Universidad Complutense de Madrid.

3 credits.

- Física Nuclear Experimental - Doctorado Interuniversitario de Física Nuclear-. Universidades y Centros del CSIC.

4 credits.

- Física Nuclear Experimental - Master Interuniversitario de Física Nuclear-. Universidades, Centros del CSIC y CIEMAT.

6 credits.

Olof Tengblad.

- Instrumentación nuclear básica -Master Universitario en Tecnología e Instrumentación Nuclear-. Universidad de Huelva.

1 credit.

- Laboratory Project - ERASMUS European Master in Nuclear Fusion and Engineering-. UCM, CIEMAT, CSIC.

6 credits.

- Detectors and Electronics in Nuclear Physics -Doctorado Interuniversitario de Física Nuclear-. Universidades y Centros del CSIC.

4 credits.

José Sánchez del Río.

- Laboratory Project -ERASMUS European Master in Nuclear Fusion and Engineering-. UCM, CIEMAT, CSIC.

9 hours.

- Física Nuclear Experimental -Máster interuniversitario de Física Nuclear-. Universidades, Centros del CSIC y CIEMAT.

6 credits.

5.1.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS

José Luis Doménech Martínez.

- Técnicas Espectroscópicas e Instrumentación –Máster interuniversitario “Láseres y aplicaciones en Química”. 60 créditos–

Universidad Coordinadora: Pablo de Olavide. Participan 9 universidades españolas más y el CSIC.

3 créditos.

5.1.4 DPTO. DE ESPECTROSCOPIA VIBRACIONAL Y PROCESOS MULTIFOTÓNICOS / VIBRATIONAL SPECTROSCOPY AND MULTIPHOTON PROCESSES

Sagrario Martínez Ramírez.

- Química del Cemento – curso doctorado- Universidad Politécnica de Madrid.

4 hours (Course of 50 credits).

Paz Sevilla Sierra.

- Física Aplicada y Fisicoquímica I-Licenciatura de Farmacia. Universidad Complutense de Madrid.

60 horas teóricas, 30 horas prácticas.

- Física Aplicada y Fisicoquímica II-Licenciatura de Farmacia. Universidad Complutense de Madrid. 75 horas prácticas.
- Caracterización de fármacos y sistemas afines-Master en Ciencias Farmacéuticas. Universidad Complutense de Madrid. 15 horas.

5.1.5 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

Mari Cruz García Gutiérrez.

- *Dispersión de rayos X: De los sistemas heterogéneos a las capas delgadas* en el Curso de postgrado: “Aplicación de la radiación sincrotrón a la caracterización de materiales” ICMSE-CSIC y Universidad de Sevilla. 27-29th of October 2010. 1 hour.

Juan Francisco Vega Borrego

- *La red de enmarañamientos en los polímeros: Experimentos, teorías y simulación por ordenador.* Máster en Alta Especialización en Plásticos y Cauchos, Universidad Internacional Menéndez Pelayo-CSIC, Instituto de Ciencia y Tecnología de Polímeros, Madrid, 5th of March 2010. 2 hours.

5.2 CURSOS Y CONFERENCIAS / COURSES AND CONFERENCES

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

Jorge Dukelsky Bercovich

- *Richardson-Gaudin models in finite Fermi systems.* Rice University, 18th of May 2010.

María Luisa Senent

- *Caracterización de cadenas carbonadas y silico-carbonadas detectables con los nuevos observatorios astronómicos,* Universidad Autónoma Metropolitana de México, June 2010.

Rafael Alejandro Molina Fernández

- *Conductance distribution for ac driven wires,* CNRS, Strasbourg (France), 9th of February 2010.
- *Conductance distribution for ac driven wires,* University of Regensburg (Germany), 9th of April 2010.

Gonzalo J. Olmo.

- *Non-Singular Cosmologies in Palatini $f(R,Q)$ Gravity,* Seminar, Universidad del País Vasco, 24th of June 2010.

Tomasz Pawłowski.

- *Big Bounce and Inhomogeneities: A Hybrid Approach,* International Loop Quantum Gravity Seminar, Phone Conference, 16th of February 2010.

R. Rodríguez-Guzmán.

- *Microscopic description of nuclear shapes with global Energy Density Functionals,* University of Surrey (UK), 5th of October 2010.

5.2.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS

Concepción Domingo Maroto

- *Fundamentos de Espectroscopía Vibracional I y II,* Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 7th and 8th of April 2010.
- *Aplicaciones de la espectroscopía SERS (Surface-Enhanced Raman Scattering) a la detección de pigmentos orgánicos naturales en objetos del Patrimonio Cultural,* Summer School on “Plasmónica: detección sobre nanoestructuras metálicas”, Jaca (Huesca), 22th of June 2010.

- *Tip-enhanced Raman Spectroscopy (TERS)*, Summer School on “Plasmónica: detección sobre nanoestructuras metálicas”, Jaca (Huesca), 24th of June 2010.

Mirta Rodríguez Pinilla

- *Quantum control of ultracold atoms and molecules*, Universidad del País Vasco, Bilbao, 28th of January 2010.

Luis Rubio-Lago

- *Laboratorio de Química General (1er curso de Grado)*, Facultad de Ciencias Físicas, Universidad Complutense de Madrid.
- *Problemas de Espectroscopía (4º curso de Licenciatura)*, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Complutense de Madrid.

5.2.4 DPTO. DE ESPECTROSCOPIA VIBRACIONAL Y PROCESOS MULTIFOTÓNICOS / VIBRATIONAL SPECTROSCOPY AND MULTIPHOTON PROCESSES

Santiago Sánchez Cortés

- *Espectroscopías Ópticas sobre nanoestructuras metálicas: hacia la detección de moléculas individuales*, Instituto de Química Física Rocasolano (CSIC), Madrid, 12th of February 2010.
- *Espectroscopías Ópticas sobre nanoestructuras metálicas: hacia la detección de moléculas individuales*, Universidad de Alcalá, 19th of February 2010.
- *Spectroscopie Optique Intensifié sur Nanostructures métalliques: vers la détection d'une seule molécule*, LASMAR, Université Moulay Ismail, Meknes, Morocco, 24th of February 2010.
- *Spectroscopie Vibrationnelle Conventionnelle et Intensifié sur Nanostructures métalliques*, LASMAR, Université Moulay Ismail, Meknes, Morocco, 25th of February 2010.
- *Espectroscopía Raman intensificada por superficies nanoestructuradas de naturaleza plasmónica (SERS)*, Escuela de verano “Plasmónica: detección sobre nanoestructuras metálicas”, Universidad de Zaragoza, Jaca (Huesca), 22nd of June 2010.
- *Surface-enhanced Optical Spectroscopy on Metallic Surfaces*, Catalysis Research Center, Hokkaido University, Sapporo (Japan), 31st of May 2010.

José A. Sánchez Gil

- *Nanostructure-enhanced Fluorescence*, Escuela de verano “Plasmónica: detección sobre nanoestructuras metálicas”, Universidad de Zaragoza, Jaca (Huesca), 22nd of June 2010.

Paz Sevilla Sierra

- *Fluorescencia de Biomoléculas sobre Nanopartículas metálicas*, Summer School on “Plasmónica: detección sobre nanoestructuras metálicas”, Jaca (Huesca), 21th of June 2010.
- *Ciencia y Arte. La espectroscopía como herramienta para investigar vidrieras y objetos históricos*. IES Salvador Dalí, 22th of April 2010.

5.2.5 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

M^a Esperanza Cagiao Escohotado.

- *Reversible crosslinking of isotactic polypropylene: Some interesting aspects*. LMPMP, Faculty of Engineering, Ferhat Abbas University, Sétif, Algeria. 14th of November 2010.

Araceli Flores Aguilar-Amat.

- *Aplicación de la radiación sincrotrón al estudio de sistemas poliméricos nanoconfinados*. Instituto de Ciencias Físicas, Universidad Nacional Autónoma de México (UNAM), Cuernavaca, Morelos, México, 16th of June 2010.
- *Correlaciones estructura-propiedades en polímeros mediante técnicas de difracción de rayos-X, micro- y nano-indentación*, Instituto de Ciencias Físicas, UNAM, México, 18th of June 2010.

Juan Francisco Vega Borrego

- *Size and conformational features of ErbB2 and ErbB3 receptors: a TEM and DLS comparative study*, Sino Biological Ltd., Beijing, China, 12th of November 2010

Javier Ramos Díaz.

- *Modelización y simulación aplicada a la física macromolecular*, LATEP, Universidad Rey Juan Carlos, Móstoles, Madrid, 16th of June 2010.

Francisco J. Baltá Calleja.

- *Microindentation hardness studies of polymer surfaces: Non-destructive characterization of biomateriales*. Institute of Polymer Research, GKSS-Research Center, Berlin, Germany, 3rd of November 2010.

Sara Sanmartín Sánchez.

- *Simulations of the crystallization process of different ethylene copolymers in the melt state*, Institut Charles Sadron, Strasbourg, France, 2nd of December 2010.

5.3 CURSOS, CONGRESOS Y SEMINARIOS ORGANIZADOS POR EL INSTITUTO / COURSES, CONGRESSES AND SEMINARS ORGANIZED BY THE INSTITUTE

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

José González Carmona.

- o *El grafeno como ejemplo de teoría de campos en $D=2$* , part of the “VII Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia”, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 24th of March 2010.

Pedro Sarriguren.

- o *Estructura Nuclear*, part of the “VII Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia”, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 24th of March 2010.

Jesús Fernando Barbero González.

- o *Relatividad General Cuántica*, part of the “VII Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia”, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 24th of March 2010.
- o *Continuidad, Suavidad, Gravedad*, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, Madrid, 8th of April 2010.

Guillermo A. Mena Marugán

- o *Unicidad de la cuantización de campos con masa variable*, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, Madrid, 21st of January 2010.

Eduardo Garrido Bellido.

- o *21st European Conference on Few-body Problems in Physics*, Salamanca (Spain), 29th of August to 3rd of September 2010.

Gonzalo J. Olmo.

- o *Non-Singular Cosmologies à la Palatini*, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, Madrid, 5th of May 2010.

Tomasz H. Pawłowski.

- o *How Sharp is the Universe's Memory?*, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, Madrid, 23th of April 2010.

Luis J. Garay.

- o *The Two Faces of Quantum Sound*, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, Madrid, 29th of April 2010.

Mercedes Martín Benito.

- o *Evolution Picture in Loop Quantum Cosmology*, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, Madrid, 1st of June 2010.
- o *Introducción a cosmología cuántica de lazos vista desde mis vivencias*, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, Madrid, 29th of October 2010.

Javier Olmedo Nieto.

- o *One Step Beyond in Loop Quantum Cosmology*, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, Madrid, 4th of February 2010.

5.3.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS

Rafael Escribano Torres

- o *Advanced Spectroscopy in Chemistry Master Course, Erasmus Mundus Programme of the EU, member of the Organizing Committee*, with participation of seven European University sites, from 2005 on.

Víctor J. Herrero

- o *11th European Vacuum Conference ECV-11 & 8th Iberian Vacuum Meeting, IVM-8 & 6th European Topical Conference on Hard Coatings*, Salamanca, 13-17th of September 2010. Member of the organizing committee.

José Luis Doménech Martínez

- o *Una nueva técnica para el estudio de la relajación rotacional: Doble resonancia Raman-Raman con resolución temporal*, Ciclo de Seminarios de IEM, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, February 2010.
- o *¿Cómo ayuda la espectroscopía láser al estudio de las atmósferas?* Part of the “VII Curso de introducción a la investigación en Estructura de la Materia”. Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 24-26th of March 2010.

Isabel Tanarro Onrubia

- o *11th European Vacuum Conference ECV-11 & 8th Iberian Vacuum Meeting, IVM-8 & 6th European Topical Conference on Hard Coatings*, Salamanca, 13-17th of September 2010. Member of the organizing committee.

Raúl Z Martínez

- o *VII Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia*, Director. Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, March 24-26, 2010.

Guzmán Tejeda Gala

- o *Espectroscopía Raman de Chorros Supersónicos*, part of the “VII Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia”, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 24th of March 2010.

Mirta Rodríguez Pinilla.

- o *Moléculas ultrafrías en redes ópticas*, part of the “VII Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia”, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 24th of March 2010.

5.3.4 DPTO. DE ESPECTROSCOPIA VIBRACIONAL Y PROCESOS MULTIFOTÓNICOS / VIBRATIONAL SPECTROSCOPY AND MULTIPHOTON PROCESSES

Pedro Carmona Hernández

- o *Aplicaciones biológicas de la espectroscopía vibracional*, part of the “VII Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia”, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 24th of March 2010.

José A. Sánchez Gil

- o *Fotónica de plasmones superficiales en nanoestructuras metálicas*, part of the “VII Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia”, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 24th of March 2010.

Irene Izquierdo Lorenzo

- o *Espectroscopía sobre nanopartículas metálicas: hacia la detección de moléculas aisladas*, part of the “VII Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia”, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 24th of March 2010.

Sagrario Martínez Ramírez, Santiago Sánchez Cortés, José A. Sánchez Gil, Paz Sevilla

- o Organizers of the Summer School of the Universidad de Zaragoza on *Plasmónica: detección sobre nanoestructuras metálicas*, Jaca, 21-25th of June 2010.

5.3.5 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

Tiberio A. Ezquerra Sanz and Aurora Nogales Ruíz.

- o *Satellite BDS2010 Tutorial Course on Physics of Dielectrics; Basic Principles and Applications*, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, Madrid, 6th of September 2010.

Tiberio A. Ezquerra Sanz and Aurora Nogales Ruíz.

- o *6th International Conference on Broadband Dielectric Spectroscopy and its Applications*, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, Madrid, 7-10th of September 2010.
Organizing Committee: T.A. Ezquerra and Aurora Nogales (Chairs) and M.C. García-Gutiérrez. Amelia Linares, D.R. Rueda, A. Sanz, J. Hernández, S. Sánchez-Cortés, C. Álvarez, C. León and A. Rivera-Calzada.

Tiberio A. Ezquerra Sanz.

- o *Presentación del VII 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, 24-26th of March 2010.

Victor Cruz Cañas, Javier Ramos Díaz, Javier Martínez de Salazar Bascuñana, Juan Francisco Vega Borrego and Ignacio López (Supercomputation Center of Galicia, CESGA)

- o *4th Meeting on High Performance Computing in Molecular Simulations (organizers)*, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 30th of September- 1st of October 2010.

M^a Cruz García Gutiérrez and Raúl Z. Martínez Torres.

- o *VII Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia: de las partículas elementales a los sistemas de alto peso molecular (organizers)*, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 24-26th of March 2010.

Juan Francisco Vega Borrego.

- o *Caracterización de macromoléculas (polímeros, biopolímeros y proteínas) por cromatografía de permeación en gel (GPC/SEC) y tiple detección TDAmx (organizer)*, IESMAT/VISCOTEK-Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, Madrid, 29th of October 2010.

Javier Ramos Díaz.

- o *Física en el mundo de las macromoléculas: desde la simulación por ordenador hasta su visualización*, part of the “VII 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, 24-26th of March 2010.

Alejandro Sanz Parras.

- o *Fuentes de neutrones y de luz sincrotrón: Aplicaciones a la física de la materia condensada blanda*, part of the “VII 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, 24-26th of March 2010.
- o *Materia Condensada Blanda: dinámica y estructura a diferentes escalas temporales y espaciales*, Ciclo de Seminarios del Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, Madrid, 15th December 2010.

Jaime J. Hernández Rueda.

- o *Nanoestructuración de películas delgadas poliméricas*, part of the “VII Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia”, Instituto de Estructura de la Materia: de las partículas elementales a los sistemas de alto peso molecular, CSIC, 24-26th of March 2010.

Rafael Nuñez Ramírez.

- o *Estudio estructural de macromoléculas sintéticas y biológicas mediante microscopía electrónica de transmisión*, part of the “VII 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, 24-26th of March 2010.

5.4 PREMIOS Y OTROS MÉRITOS / AWARDS

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

Jesús Fernando Barbero González.

- Member of the Scientific Advisory Committee of the Workshop *Open Problems in Loop Quantum Gravity*. Zakopane (Poland).
- Member of the Scientific Advisory Committee of the *XIX International Fall Workshop on Geometry and Physics*, Porto (Portugal).

Luis J. Garay Elizondo.

- Member of the Local Organizing Committee of the *Spanish Relativity Meeting-ERE 2010*, Granada (Spain).

Elvira Moya de Guerra.

- President of the *National Committee of Evaluation of Research Activity* (CNEAI) of Physics and Mathematics, Madrid (Spain).
- Vicepresident of the *Accreditation Committee of Science Professors* (ANECA), Madrid (Spain).
- Medal of Merit in Research, public outreach and teaching of Physics of *La Real Sociedad Española de Física*.
- Member of the *Editorial Board* of The Annals of the Academy of Romanian Scientists (Physics Series).
- Scientific Advisor of the *Agencia Andaluza de Evaluacion de la Calidad y Acreditacion Universitaria*.

Mikel Fernández Méndez.

- Special Award to the Best Graduate Student in Physics (*Premio Extraordinario de Licenciatura*), Facultad de Física, Universidad Complutense de Madrid, 2010.

5.4.2 DPTO. DE FÍSICA NUCLEAR Y FÍSICA ESTADÍSTICA / NUCLEAR PHYSICS AND STATISTICAL PHYSICS

M^a José García Borge.

- Member of the International Advisory Committee of *EURORIB10*, Lamoura (France).
- Member of the International Advisory Committee of *INPC2010 –International Nuclear Physics Conference-*, Vancouver (Canada).
- Member of the International Advisory Committee of *FINUSTAR 3-International Conference on Frontiers In Nuclear STructure, Astrophysics and Reactions-*, Rhodas (Greece).
- Member of Panel of Experts Programme Advisory Committee (PAC) of the *Laboratori Nazionali del Sud* (Catania, Italy) since 2009.
- Spanish expert representative on the Committee for Nuclear Physics of the *European Science Foundation* (NuPECC) since January 2009.
- Assistant Programme Manager of the *Directorate General FPA Research Projects*, March 2010.
- Chairman of the *Collaboration ISOLDE (CERN)* from 2009 to 2011.
- Organizer of the Conferences:
 - ♦ *Town Meeting of the LRP2010: Perspectives of Nuclear Physics Research in Europe*, Madrid, 31st May-2nd of June 2010.
 - ♦ *21st European Few Body Conference*, Salamanca, 29th of August-3rd of September 2010.
 - ♦ *ISOLDE Workshop*, CERN, Geneva (Switzerland), 8-10th December 2010.

Olof Tengblad.

- Expert in project evaluation IDEAS ERC -*European Research Council-*.
- Deputy Chairman Technical board of the *R3B collaboration GSI-FAIR* since 2004.
- Member of Scientific Committee of the *Centre for Micro-Analysis of Materials* of the Autonomia University of Madrid.

Carlos Cabrillo García.

- Member of the Scientific Committee of the College 6, *Structure and Dynamics of Liquid and Glasses of Institute Laue Langevin (ILL)*, Grenoble (France).

5.4.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS

Dionisio Bermejo Plaza.

- Member of the Steering Committee of the *Colloquium on High Resolution Molecular Spectroscopy*
- Member of the Steering Committee of the *CARS (Coherent Anti-stokes Raman Spectroscopy) Workshop and ECONOS (European Conference On Non-Linear Raman Spectroscopy)*.
- Member of the Steering Committee of the *International Conference on Spectral Line shapes*

Concepción Domingo Maroto.

- Adjoint Coordinator of the Physics Area, CSIC (July 2008-December 2010).
- Spanish Representative in the COST Action D42: “Chemical Interactions between Cultural Artefacts and Indoor Environment (EnviArt)”. (Program “Chemistry and Molecular Sciences and Technologies”, CSMT).
- Spanish Representative in the COST Action MP0603: “Chemical imaging by means of CARS-microscopy (MicroCARS)” (Program “Materials, Physical and Nanosciences”, MPNS).

Rafael Escribano Torres.

- Member of the Meetings Committee of the American Geophysical Union.

Víctor José Herrero.

- Member of the board of the “Asociación Española de Vacío y sus aplicaciones”(ASEVA).
- Vicepresident of the board of the “Grupo Especializado de Física Atómica y Molecular” (GEFAM) of the “Real Sociedad Española de Física” (RSEF).

Salvador Montero Martín.

- Member of the Editorial Board of the *Journal of Raman Spectroscopy*, Wiley (United Kingdom).
- Session Chairman of the 27th International Symposium on Rarefied Gas Dynamics (27RGD), Pacific Grove, California (USA), July 2010.

Isabel Tanarro Onrubia.

- Member of the board of the “Asociación Española de Vacío y sus aplicaciones”(ASEVA).

Guzmán Tejeda Gala.

- Secretary of the Sociedad Española de Optica (SEDOPTICA).

Mirta Rodríguez Pinilla.

- Member of the Scientific Committee of ANEP for the Juan de la Cierva 2010.

5.4.4 DPTO. DE ESPECTROSCOPIA VIBRACIONAL Y PROCESOS MULTIFOTÓNICOS / VIBRATIONAL SPECTROSCOPY AND MULTIPHOTON PROCESSES

Juana Bellanato Fontecha

- Member of the International Committee of the *European Congresses on Molecular Spectroscopy* (EUCMOS).
- Attendance to the Meeting of the International Committee of the EUCMOS 2010, Florence (Italy), 2nd of September 2010.

Santiago Sánchez Cortés

- Member of the Scientific Committee of the *XXII Reunión Nacional de Espectroscopía. VI Congreso Ibérico de Espectroscopía*, Oporto (Portugal) 8-10th of September 2010.
- Member of the Scientific Committee of the *Rencontre International de Spectroscopie et Optique (RISO 2010)*, Errachidia (Marruecos), 15-16th of October 2010.

José A. Sánchez Gil

- Member of the Scientific Committee of the *10ª Conferencia Española de Nanofotónica*, Segovia (Spain).

- Member of the Scientific Reviewing Panel of the *4th International Congress on Advanced Electromagnetic Materials in Microwaves and Optics (METAMATERIALS 2010)*, Karlsruhe (Alemania).

Paz Sevilla Sierra.

- Member of the Scientific Committees of the VI Congresso Ibérico de Espectroscopia - XXII Reunión Nacional de Espectroscopia (VI CIE - XXII RNE), Porto (Portugal)

5.4.5 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

Tiberio A. Ezquerro Sanz.

- Member of the *Scientific Advisory Committee (SAC)* of the French Synchrotron SOLEIL (France), since December 2005.
- Member of *Review Panel Committee "Soft Condensed Matter and Scattering"* of HASYLAB, DESY, Hamburg (Germany), since October 2006.
- Member of the *International Dielectric Society Board* of the *International Dielectric Society* (<http://permittivity.org>).
- Member of the *Peer Review Committee 3*, Chemistry, Condensed matter, Nano-chemistry, Soft condensed matter of the French Synchrotron SOLEIL, since January 2008.
- Member of the *Scientific Council (SCO)* of the Institut Laue-Langevin, Grenoble, France.

Javier Martínez de Salazar Bascuñana.

- Member of *Trusties of Board of Agencia Estatal CSIC*, Ministerio de Ciencia e Innovación, since March 2008.
- Member of the *Committee: Executive Board of the European Polymer Federation*, European Science Foundation, since March 1996.
- Member of the *Editorial Board* of the journal "e-Polymer".
- *Editor Assistant* of the journal "e-Polymer".

Mari Cruz García Gutiérrez.

- Member of the *Executive Board* of the Spanish Synchrotron Users Organization (AUSE), since July 2007.
- *Spanish delegate* of the European Synchrotron Users Organization (ESUO), since January 2010.
- CSIC Expert at the Research Infrastructures Programme Committee of the FP7 specific programme Capacities of the European Union, since January 2010.

Araceli Flores Aguilar-Amat.

- Member of the scientific committee of the POLYCHAR World Forum.

Juan Francisco Vega Borrego.

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

Francisco J. Baltá Calleja.

- *Honorary Member* of the *Real Sociedad Española de Física*.
- Member of the *Board of the Society* for International Studies (SEI), Madrid.
- *Honorary Member* of the *Akademie Mitteldeutsche Kunststoffinnovationen*, Merseburg, Germany.
- Member of the *Royal Academy of Sciences*, Barcelona.
- Member of *Editorial Board* of the "Journal of Applied Polymer Science".
- Member of *Editorial Board* of the "International Journal of Polymeric Materials".
- Member of *Editorial Board* of the "Journal of Polymer Engineering".
- Member of *Editorial Board* of the "Journal of Macromolecular Science-Physics".
- Member of *Editorial Board* of the journal "e-Polymers".

5.5 ACTIVIDADES Y MATERIAL DE DIVULGACIÓN / OUTREACH **ACTIVITIES AND MATERIAL**

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

José González Carmona

Electrónica del Grafeno, José González Carmona, Angeles Hernández Vozmediano and Francisco Guinea.
Revista Investigación y Ciencia.
September 2010.

Jesús Fernando Barbero González

Menudos elementos: todo lo que usted quiso saber sobre la tabla periódica pero nunca se atrevió a preguntar.
I.E.S. El Álamo (Madrid).
4th of February 2010.

Menudos elementos: todo lo que usted quiso saber sobre la tabla periódica pero nunca se atrevió a preguntar. X Semana de la Ciencia de la CAM.
Instituto de Estructura de la Materia CSIC, Madrid.
11th of November 2010

Guillermo A. Mena Marugán

Física de Agujeros Negros.
I.E.S. Salvador Dalí, Leganés (Madrid).
22nd of April 2010.

Del Big Bang al Big Bounce. X Semana de la Ciencia de la CAM.
Instituto de Estructura de la Materia CSIC, Madrid.
19th of November 2010

Del Big Bang al Big Bounce.
Web: <http://www.iem.csic.es/semanaciencia/semanaciencia10/semciencia10-Mena.pdf>
Repositorio Digital.CSIC: <http://hdl.handle.net/10261/30810>
19th of November 2010.

Pablo San José Martín

Interview in the Spanish newspaper “El Mundo” on fluorographene.
‘Superteflón’ para el hogar del futuro,
14th of November 2010.

Luis J. Garay Elizondo

Los agujeros negros no son tan negros... o sí. X Semana de la Ciencia de la CAM.
Instituto de Estructura de la Materia CSIC, Madrid.
19th of November 2010.

Los agujeros negros no son tan negros... o sí.
Web: <http://www.iem.csic.es/semanaciencia/semanaciencia10/semciencia10-Garay.pdf>
Repositorio Digital.CSIC: <http://hdl.handle.net/10261/30813>
19th of November 2010.

Javier Olmedo Nieto.

Principios de Relatividad y leyes de la Física.
I.E.S. Joaquín Araujo, Fuenlabrada (Madrid).
7th of April 2010.

Gravedad y cosmología: ¿qué hay de verdad y mentira en la ciencia televisiva?. X Semana de la Ciencia de la CAM.
Instituto de Estructura de la Materia CSIC, Madrid.
12th of November 2010.

Gravedad y cosmología: ¿qué hay de verdad y mentira en la ciencia televisiva?
Repositorio Digital.CSIC: <http://hdl.handle.net/10261/30819>
12th of November 2010.

5.5.2 DPTO. DE FÍSICA NUCLEAR Y FÍSICA ESTADÍSTICA / NUCLEAR PHYSICS AND STATISTICAL PHYSICS

M^a José García Borge.

El núcleo: un viaje al centro de la materia, Semana de la Ciencia de la CAM, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, Madrid, 10th of November 2010.

José Sánchez del Río, Olof Tengblad, Mariano Carmona, Jose Antonio Briz, Angel Perea, Mario Cubero, Carlos Cruz, M^a José García Borge.

Local Organizers.

NuPECC Town Meeting Madrid 2010, CSIC (Spain).

31st of May-1st of June 2010.

5.5.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS

Salvador Montero Martín

Kronos und Cairos (Überlegungen über Zeit und Moment).

Bezirkskrankenhaus Franken, Ausbach (Germany).

24th of September 2010.

Isabel Tanarro Onrubia

Los Plasmas: de la aurora boreal al interior de una estrella, del tubo fluorescente al reactor de fusión, X Semana de la Ciencia de la Comunidad de Madrid, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 8th of November 2010

Óscar Gálvez

Hielo en el Universo: de la Tierra al medio interestelar, X Semana de la Ciencia de la Comunidad de Madrid, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 15th of November, 2010.

Mirta Rodríguez Pinilla

Demostración del principio de la fibra óptica. X Semana de la Ciencia de la Comunidad de Madrid, IEM, CSIC, November 2010.

5.5.4 DPTO. DE ESPECTROSCOPIA VIBRACIONAL Y PROCESOS MULTIFOTÓNICOS / VIBRATIONAL SPECTROSCOPY AND MULTIPHOTON PROCESSES

Sagrario Martínez Ramírez

Jornada Ciencia y Conservación del Patrimonio Arquitectónico

Fundación COAM, Madrid

7th of June 2010

Taller sobre *Mis primeros pasos en la Ciencia*, X Semana de la Ciencia de la CAM.

Instituto de Estructura de la Materia (CSIC), Madrid

16-18th of November 2010

José A. Sánchez Gil

Conferencia sobre *Nanoantenas metálicas como sensores moleculares*, X Semana de la Ciencia de la CAM.

Instituto de Estructura de la Materia (CSIC), Madrid

16th of November 2010

5.5.5 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

Víctor Cruz Cañas.

Visita al Cluster de Cálculo Científico del CSIC, X Semana de la Ciencia de la CAM.

IEM-CSIC y SGAI-CSIC.

18th of November 2010.

Rafael Núñez Ramírez.

Visita al Microscopio Electrónico de Transmisión, X Semana de la Ciencia de la CAM.
IEM-CSIC y SGAI-CSIC.
18th of November 2010.

5.6 TRANSFERENCIA DE TECNOLOGÍA / TRANSFER OF TECHNOLOGY

5.6.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS

Informes de transferencia tecnológica:

I. Tanarro, V. J. Herrero.

Report on Task Agreement: CIEMAT-WP09-PWI-02-05: “*Thermo-oxidation by NO₂*”.
(May 2010).

5.6.5 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

Visitas:

Javier Martínez-Salazar y Juan Francisco Vega.

Sino Biological Ltd.
Beijing (China).
11-14th of November 2010.

Ignacio Martín-Fabiani Carrato.

Empresa Única.
8th of June 2010.

Reuniones de transferencia de tecnología:

Meeting attends: Tiberio A. Ezquerro.

Collaboration: FAE, S.A.

Place: Hospitalet de Llobregat (Barcelona).

Date: 21st of September 2010.

Meeting attends: Nuria Robledo, Juan Francisco Vega y .Javier Martínez de Salazar.

Collaboration: Dow Chemicals Ibérica.

Place: Madrid.

Date: 21st of April 2010.

Meeting attends: Nuria Robledo, Juan Francisco Vega y .Javier Martínez de Salazar.

Collaboration: Dow Chemicals Ibérica.

Place: Madrid.

Date: 7st of July 2010.

Conferencias de transferencia tecnológica impartidas u organizadas por el Instituto:

Speaker: Nuria Robledo Alvaro.

Title: Study of Molecular Effects on the Kinetics of Melt Miscibility between LLDPE/LDPE, and its Modification with External Means. II.

Colaboration: **IEM/Dow Chemical Ibérica.**

Place: Instituto de Estructura de la Materia, CSIC.

Dates: 21th of April 2010.

Speaker: Juan Francisco Vega Borrego.

Title: Study of Molecular Effects on the Kinetics of Melt Miscibility between LLDPE/LDPE, and its Modification with External Means. II.

Colaboration: **IEM/Dow Chemical Ibérica.**

Place: Instituto de Estructura de la Materia, CSIC.

Dates: 7th of July 2010.

Informes de transferencia tecnológica:

Nuria Robledo Alvaro, Juan Francisco Vega Borrego y Javier Martínez-Salazar.

Study of Molecular Effects on the Kinetics of Melt Miscibility between LLDPE/LDPE, and its Modification with External Means.II.

Dow Chemical Ibérica (July 2010).

5.7 UNIDADES ASOCIADAS Y OTRAS ACTIVIDADES / ASSOCIATED UNITS AND OTHER ACTIVITIES

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

Jorge Dukelsky Bercovich

- o *Organización del Workshop "Quantum Phase Transitions in Molecular and Nuclear Structure.*
Huelva; Mayo 17-18 2010. En colaboración con la Unidades Asociadas de Sevilla y Huelva.

Unidades Asociadas

- Unidad Asociada **Grupo de Física Nuclear**, entre el IEM, CSIC (responsable Pedro Sarriguren Suquibide) y el Dpto. de Física Atómica, Molecular y Nuclear de la Universidad Complutense de Madrid (responsable E. Moya Valgañón), renovada por el periodo 2011-2013.

5.7.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS

Unidades asociadas

- Unidad Asociada “Química Física Molecular” entre el IEM e IQFR, CSIC (responsable Víctor J. Herrero) y el Dpto. de Química Física I, Universidad Complutense de Madrid (responsable F. Javier Aoiz), renovada por el periodo 2009-2012.

5.7.4 DPTO. DE ESPECTROSCOPIA VIBRACIONAL Y PROCESOS MULTIFOTÓNICOS / VIBRATIONAL SPECTROSCOPY AND MULTIPHOTON PROCESSES

Otras actividades / Other activities

Sagrario Martínez Ramírez.

- o Comité Técnico de Normalización CTN80: Subcomité STN02/CTN-80. Propiedades Químicas. Madrid, May 2010.

Unidades asociadas

- Unidad Asociada entre el IEM, CSIC (responsable Santiago Sánchez Cortés) y el Grupo de Espectroscopía y Estructura Molecular (Departamento de Química Física) de la Universidad de Málaga (responsable Juan Carlos Otero), renovada por el periodo 2009-2012.

- Unidad Asociada entre el IEM, CSIC (responsable Concepción Domingo Maroto) y el Grupo de Espectroscopía y Estructura Molecular (Departamento de Física de la Materia Condensada, Cristalografía y Mineralogía) de la Universidad de Valladolid (responsable José Antonio de Saja), renovada por el periodo 2009-2012.

5.7.5 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

Patentes:

Título: PROCEDIMIENTO DE OBTENCIÓN DE MATERIALES COMPUESTOS COMO CONDUCTORES ELÉCTRICOS.

Autores: A. Linares, T.A. Ezquerro, J.C. Canalda.

Número de solicitud: P201031143.

Fecha: 23 de julio de 2010.

Otras actividades / Other activities

Tiberio Ezquerro Sanz. Short stays:

- o Participation as member for the CSIC, European Science Foundation MO Forum: Medium-Sized Research Infrastructures, Strasbourg, France, 10-12th of January 2010
- o DESY/HASYLAB, Experimentación en la línea BW4, Hamburg, Germany, 15-19th of March 2010.
- o Inauguración del Sincrotrón Español ALBA, Barcelona, 22-23rd of March 2010.
- o Scientific Council Meeting, Institute Laue-Langevin, Grenoble (France). 14-16th of April 2010.
- o Review Panel Committee, HASYLAB (participation as member of the Committee), Hamburg, Germany, 20-23rd of April 2010.
- o CNRS, Mulhouse, France. Presidente tribunal de tesis doctoral “Morphology and thermal behaviour of single crystals of PS-b-PEO block copolymers”, 25th and 26th of April 2010.
- o Review Panel Committee, HASYLAB (participation as member of the Committee), Hamburg, Germany, 14-15th of October 2010.
- o Scientific Council Meeting, Institute Laue-Langevin, Grenoble (France). 20-22nd of October 2010.
- o Review Panel Committee, SOLEIL French Synchrotron (participation as member of the Committee), Paris (France), 14-16th of November 2010.
- o DESY/HASYLAB, Experimentación en la línea BW4, Hamburg, Germany, 16-20th of November 2010.
- o European Synchrotron Radiation Facility (ESRF), Grenoble, France, 10-13th of December 2010.

Javier Martínez de Salazar Bascuñana. Short stay:

- o Laboratorio Nacional de Tecnología (LANOTEC), San José, Costa Rica, 22nd and 23rd of July 2010.

Aurora Nogales Ruiz. Short stays:

- o 239th National Meeting of the American Chemical Society (ACS), San Francisco (USA), 20-27th of March 2010.
- o 6th International ECNP, Conference on Nanostructured Polymers and Nanocomposites, Madrid (Spain), 28-30th of April 2010.
- o Miembro de un tribunal de oposición a Científicos Titulares, Barcelona, 22-29th of November 2010.
- o European Synchrotron Radiation Facility (ESRF), Grenoble, France, 8-13th of December 2010.

Daniel R. Rueda Bravo. Short stays:

- o DESY/HASYLAB, Experimentación en la línea BW4, Hamburg, Germany, 15-19th of March 2010.
- o DESY/HASYLAB, Experimentación en la línea BW4, Hamburg, Germany, 16-20th of November 2010.

Fernando Ania García. Short stay:

- o DESY/HASYLAB, Experimentación en la línea BW4, Hamburg, Germany, 24-29th of October 2010.

Araceli Flores Aguilar-Amat. Short stay:

- o DESY/HASYLAB, Experimentación en la línea BW4, Hamburg, Germany, 24-29th of October 2010.

Mari Cruz García-Gutiérrez. Short stays:

- o Participation as Spanish representative at the 1st Meeting of the “European Synchrotron User Organization” (ESUO), Lisboa (Portugal), 17-18th of January 2010.

- o Participation as CSIC Expert, 11th Meeting of the Research Infrastructures Programme Committee of the FP7 specific programme Capacities, Brussels, Belgium, 25th of January 2010
- o DESY/HASYLAB, Experimentación en la línea BW4, Hamburg, Germany, 28th of February-2nd of March 2010.
- o Participation as CSIC Expert, 12th Meeting of the Research Infrastructures Programme Committee of the FP7 specific programme Capacities, Brussels, Belgium, 19th of March 2010.
- o Inauguración del Sincrotrón Español ALBA, Barcelona, 22nd of March 2010.
- o Visita a la Sala Blanca del Centro Nacional de Microelectrónica, Barcelona, 23rd of March 2010.
- o Participation as CSIC Expert, 13th Meeting of the Research Infrastructures Programme Committee of the FP7 specific programme Capacities, Brussels, Belgium, 2nd of July 2010.
- o Participation as CSIC Expert, 14th Meeting of the Research Infrastructures Programme Committee of the FP7 specific programme Capacities, Brussels, Belgium, 22nd of October 2010.

Juan Francisco Vega Borrego. Short stays:

- o ICPC Short Course 2010 Edition, Shanghai (China), 7th of November 2010.

Alejandro Sanz Parras. Short stays:

- o Curso JCNS School on Data Analysis for Quasielastic Neutron Scattering with FRIDA, Laboratorio FRMII, Garching, Munich. Germany, 27-30th of April 2010.
- o Asistencia a ‘School on Data Analysis with FRIDA’, Garching, Germany 28-29th of April 2010
- o Visita al Imperial College de Londres, Londres, United Kingdom, 25-29th of November 2010.
- o European Synchrotron Radiation Facility (ESRF), Grenoble, France, 8-13th of December 2010.

Francisco J. Baltá Calleja. Short stays:

- o Round Table Discussions, Alexander von Humboldt Foundation, Bonn, Germany, 27th of May 2010.
- o Annual Meeting 2010 Alexander von Humboldt Foundation, Berlin (Germany), 21-23rd of June 2010.
- o Synchrotron DESY/HASYLAB, Hamburg, Germany, 3-8th of July 2010.
- o Synchrotron DESY/HASYLAB, Hamburg, Germany, 25-29th of October 2010.
- o Workshop: Standard Data Formats for Experiments with Photons, Neutrons, and Ions, Hamburg, Germany, 27-29th of October 2010.

Jaime J. Hernández Rueda. Short stays:

- o DESY/HASYLAB, Experimentación en la línea BW4, Hamburg, Germany, 15-19th of March 2010.

Ignacio Martín-Fabiani Carrato. Short stays:

- o DESY/HASYLAB, Experimentación en la línea BW4, Hamburg, Germany, 15-19th of March 2010.
- o DESY/HASYLAB, Experimentación en la línea BW4, Hamburg, Germany, 16-20th of November 2010.

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. I. Agullo, J. Fernando Barbero G., J. Díaz Polo, E. F. Borja and Eduardo J. S. Villaseñor.
Detailed Black hole state counting in loop quantum gravity.
Physical Review D **82**, 084029 (2010).
2. I. Agullo, J. Navarro-Salas, Gonzalo J. Olmo and L. Parker.
Acceleration Radiation, Transition Probabilities, and Trans-Planckian Physics.
New Journal of Physics **12**, 095017 (2010).
3. I. Agullo, J. Navarro-Salas, Gonzalo J. Olmo and L. Parker.
Hawking Radiation by Kerr Black Holes and Conformal Symmetry.
Physical Review Letters **105**, 211305 (2010).
4. I. Agullo, J. Navarro-Salas, Gonzalo J. Olmo and L. Parker.
Revising the observable consequences of slow-roll inflation.
Physical Review D **81**, 043514 (2010).
5. I. Agullo, J. Navarro-Salas, Gonzalo J. Olmo and L. Parker.
Reply to "Comment on Insensitivity of Hawking Radiation to an Invariant Planck-Scale Cutoff".
Physical Review D **81**, 108502 (2010).
6. I. Agullo, J. Navarro-Salas, Gonzalo J. Olmo and L. Parker.
Inflation, Renormalization and CMB Anisotropies.
Journal of Physics Conference Series **229**, 012058 (2010).
7. R. Álvarez-Rodríguez, A. S. Jensen, E. Garrido and D. V. Fedorov.
Structure and three-body decay of ^9Be resonances.
Physical Review C **82**, 034001 (2010).
8. J. Barea, J. M. Arias and J. E. García-Ramos.
Relationship between $X(5)$ models and the interacting boson model.
Physical Review C **82**, 024316 (2010).
9. J. Fernando Barbero G. and Eduardo J. S. Villaseñor.
Quantization of midisuperspace models.
Living Reviews in Relativity **13**, 6 (2010).
10. C. Barceló, Luis J. Garay and G. Jannes.
The Two Faces of Quantum Sound.
Physical Review D **82**, 044042 (2010).
11. C. Barragán and Gonzalo J. Olmo.
Isotropic and Anisotropic bouncing Cosmologies in Palatini Gravity.
Physical Review D **82**, 084015 (2010).
12. G. F. Bertsch, J. Dukelsky, B. Errea and C. Esebbag.
Pairing in 4-component fermion systems: The bulk limit of $SU(4)$ -symmetric Hamiltonians.
Annals of Physics **325**, 1340 (2010).
13. D. Brizuela, J.M. Martín-García, U. Sperhake, K.D. Kokkotas.
High-order perturbations of a spherical collapsing star.
Physical Review D **82**, 104039 (2010).
14. D. Brizuela, Guillermo A. Mena Marugán and Tomasz Pawłowski.
Big Bounce and Inhomogeneities.

15. J. Cortez, Guillermo A. Mena Marugán and J. M. Velhinho.
Fock Quantization of a Free Scalar Field with Time Dependent Mass on the Three-Sphere: Unitarity and Uniqueness.
Physical Review D **81**, 044037 (2010).
16. J. Cortez, Guillermo A. Mena Marugán, Javier Olmedo and J. M. Velhinho.
A Unique Fock Quantization for Fields in Non-Stationary Spacetimes.
Journal of Cosmology and Astroparticle Physics **1010**, 030 (2010).
17. R. de Diego, E. Garrido, D.V. Fedorov, A.S. Jensen.
Few-body reactions in nuclear astrophysics: Application to He-6 and Be-9 production.
AIP Conference Proceedings **1231**, 175-176 (2010).
18. R. de Diego, E. Garrido, D. V. Fedorov and A. S. Jensen.
Relative production rates of ${}^6\text{He}$, ${}^9\text{Be}$, ${}^{12}\text{C}$ in astrophysical environments.
EPL-Europhys Lett **90**, 52001 (2010).
19. R. de Diego, E. Garrido, D. V. Fedorov and A. S. Jensen.
Alternative path for bridging the $A=5,8$ gap in nucleon-rich nucleosynthesis scenarios.
Journal of Physics G: Nuclear and Particle Physics **37**, 115105 (2010).
20. R. de Diego, E. Garrido, D. V. Fedorov and A. S. Jensen.
Astrophysical reaction rates for ${}^6\text{He}$ and ${}^9\text{Be}$ production by electromagnetic radiative capture and four-body recombination.
Journal of Physics: Conference Series **205**, 012047 (2010).
21. B. Errea, S. Lerma.
Exact solution of the Isovector-Isoscalar pairing interaction.
AIP Conference Proceedings **1231**, 179-180 (2010).
22. E. Faleiro, L. Muñoz, A. Relaño, J. Retamosa.
Spectral statistics applied to TeV cosmic gamma/proton discrimination.
Astroparticle Physics **33**, 206-215 (2010).
23. P. N. de Faria, ..., M. Rodríguez-Gallardo, *et al.*
Elastic scattering and total reaction cross section of He-6+Sn-120.
Physical Review C **81**, 044605 (2010).
24. J. P. Fernández-García, M. A. G. Álvarez, A. M. Moro and M. Rodríguez-Gallardo.
Simultaneous analysis of elastic scattering and transfer/breakup channels for the He-6+Pb-208 reaction at energies near the Coulomb barrier.
Physics Letters B **693**, 310 (2010).
25. J. P. Fernández-García, M. Rodríguez-Gallardo, M. A. G. Álvarez and A. M. Moro.
Long range effects on the optical model of He-6 around the Coulomb barrier.
Nuclear Physics A **840**, 19 (2010).
26. Luis J. Garay, Mercedes Martín-Benito and Guillermo A. Mena Marugán.
Inhomogeneous Loop Quantum Cosmology: Hybrid Quantization of the Gowdy Model.
Physical Review D **82**, 044048 (2010).
27. E. Garrido, D. V. Fedorov and A. S. Jensen.
Above threshold s-wave resonances illustrated by the $1/2^+$ states in ${}^9\text{Be}$ and ${}^9\text{B}$.
Physics Letters B **684**, 132-136 (2010).
28. J. González.
Renormalization group approach to chiral symmetry breaking in graphene.
Physical Review B **82**, 155404 (2010).
29. J. González and J. Herrero.

- Graphene wormholes: A condensed matter illustration of Dirac fermions in curved space.*
Nuclear Physics B **825**, 426 (2010).
30. V. A. Gopar and R. A. Molina.
Controlling the conductance statistics of quantum wires by driving ac fields.
Physical Review B **81**, 195415 (2010).
 31. J. Haruyama, J. González, E. Perfetto, E. Einarson, S. Maruyama and H. Shinohara.
Interplay of Tomonaga-Luttinger liquids and superconductive phase in carbon nanotubes.
EPL-Europhys Lett **89**, 27003 (2010).
 32. M. Hochlaf, G. Chambaud and M.L.Senent.
H₂NSi radical: structures, isomerisation pathways and electronic states characterisation.
Molecular Physics **108**(10), 1277-1284 (2010).
 33. N. Inostroza, R. Letelier and M. L. Senent.
On the numerical determination of Dunham's coefficients. An application to X¹Σ⁺HCl isotopomers.
Journal of Molecular Structure (TEOCHEM) **947**(1-3), 40-44 (2010).
 34. N. Inostroza and M. L. Senent.
Theoretical characterization of the SiC₃H⁻ anion
Journal of Chemical Physics **133**, 184107 (2010).
 35. L. Isaev, G. Ortiz and J. Dukelsky.
Phase diagram of the Heisenberg antiferromagnet with four-spin interactions.
Journal of Physics: Condensed Matter **22**, 016006 (2010).
 36. L. Isaev, G. Ortiz and J. Dukelsky
Comment on "Quantum phase transition in the four-spin exchange antiferromagnet".
Physical Review B **82**, 136401 (2010).
 37. A. S. Jensen, D. V. Fedorov and E. Garrido.
Rearrangements in Three-body Decaying Resonances.
Journal of Physics G: Nuclear and Particle Physics **37**, 064027 (2010).
 38. W. Kaminski and Tomasz Pawłowski.
The LQC Evolution Operator of FRW Universe with Positive Cosmological Constant.
Physical Review D **81**, 024014 (2010).
 39. W. Kaminski and Tomasz Pawłowski.
Cosmic Recall and the Scattering Picture of Loop Quantum Cosmology .
Physical Review D **81**, 084027 (2010).
 40. A. Kievsky, M. Viviani, P. Barletta, C. Romero-Redondo and E. Garrido.
Variational description of continuum states in terms of integral relations.
Physical Review C **81**, 034002 (2010).
 41. J. A. Lay, D. V. Fedorov, A. S. Jensen, E. Garrido and C. Romero-Redondo.
Three-body structure of low-lying ¹⁸Ne states.
European Physical Journal A **44**, 261-277 (2010).
 42. Mercedes Martín-Benito, Guillermo A. Mena Marugán and E. Wilson-Ewing.
Hybrid Quantization: From Bianchi I to the Gowdy Model.
Physical Review D **82**, 084012 (2010).
 43. E. Martín-Martínez, Luis J. Garay and J. León.
Unveiling Quantum Entanglement Degradation near a Schwarzschild Black Hole.
Physical Review D **82**, 064006 (2010).
 44. E. Martín-Martínez, Luis J. Garay and J. León.
Quantum Entanglement Produced in the Formation of a Black Hole.
Physical Review D **82**, 064028 (2010).

45. J. L. McChesney, A. Bostwick, T. Ohta, T. Seyller, K. Horn, J. González and E. Rotenberg.
Extended van Hove singularity and superconducting instability in doped graphene.
Physical Review Letters **104**, 136803 (2010).
46. Irving O. Morales, P. Van Isacker, V. Velazquez, J. Barea, J. Mendoza-Temis, J. C. LópezVieyra, J. G. Hirsch and A. Frank.
Image reconstruction techniques applied to nuclear mass models.
Physical Review C **81**, 024304 (2010).
47. R. A. Molina, A. Relaño, J. Retamosa, L. Muñoz, E. Faleiro and J. M. G. Gómez.
Perspectives on $1/f$ noise in quantum chaos.
Journal of Physics: Conference Series **239**, 012001 (2010).
48. O. Moreno, R. Alvarez-Rodriguez, E. Moya de Guerra, P. Sarriguren, F. Simkovic and A. Faessler.
Test of the single-satate dominance hypothesis for two-neutrino double-beta decay.
Topics in Astroparticle and Underground Physics (TAUP).
Journal of Physics Conference Series Vol. **203**, 012063 (2010).
IOP Publishing (UK)
49. O. Moreno, E. Moya de Guerra, P. Sarriguren and A. Faessler.
Theoretical mean-field and experimental occupation probabilities in the double-beta system ^{76}Ge to ^{76}Se .
Physical Review C **81** (Rapid Communications), 041303(R) (2010).
50. O. Moreno, E. Moya de Guerra, P. Sarriguren and J. M. Udias.
Parity violating electron scattering and nuclear structure.
Journal of Physics G: Nuclear and Particle Physics **37**, 064019 (2010).
51. S. Orlandini, E. Coccia, I. Baccarelli, F. A. Gianturco, E. Garrido, T. González-Lezana, G. Delgado-Barrio, and P. Villarreal.
Binding He atoms to hydorgen moieties: Quantum features from ultraweak interactions.
Molecular Physics **108**, 57-72 (2010).
52. M. Paolone, ..., J.R. Vignote, *et al.*
Polarization transfer in the $4\text{He}(e,e'p)^3\text{H}$ reaction at $Q^2=0.8$ and $1.3 (\text{GeV}/c)^2$
Physical Review Letters **105**, 072001 (2010).
53. J.C. Pei, J. Dukelsky, W. Nazarewicz.
Competition between normal superfluidity and Larkin-Ovchinnikov phases of polarized Fermi gases in elongated traps.
Physical Review A **82**, 021603 (2010).
54. P. Perez-Fernandez, A. Relaño, J. M. Arias, J. E. García-Ramos and J. Dukelsky.
Connection between decoherence and excited state quantum phase transitions.
Proceedings of the International Scientific Meeting. La Rábida 2009.
AIP Conference Proceedings **1231**, 233-234 (2010).
55. E. Prada, P. San-Jose and L. Brey.
Zero Landau Level in Folded Graphene Nanoribbons.
Physical Review Letters **105**, 106802 (2010).
56. S. Riordan, J. R. Vignote, *et al.*
Measurements of the Electric Form Factor of the Neutron up to $Q^2=3.4 (\text{GeV}/c)^2$ Using the Reaction $^3\text{He}(e,e'n)pp$.
Physical Review Letters **105**, 262302 (2010).
57. M. Rodríguez-Gallarrdo, J. M. Arias, J. Gómez-Camacho, A. M. Moro, I. J. Thomson and J. A. Tostevin.
Four-body continuum-discretized coupled-channels calculations: Application to $\text{He-6}+\text{Zn-64}$ at 13.6 MeV
AIP Conference Proceedings **1231**, 235 (2010).
58. R. Rodriguez-Guzman, P. Sarriguren and L. M. Robledo.

Systematics of one-quasiparticle configurations in neutron-rich odd Sr, Zr, and Mo isotopes with the Gogny energy density functional

Physical Review C **82**, 044318 (2010).

59. R. Rodriguez-Guzman, P. Sarriguren and L. M. Robledo.
Signatures of shape transition in odd-A neutron-rich Rubidium isotopes.
Physical Review C **82** (Rapid Communications), 061302 (R) (2010).
60. R. Rodriguez-Guzman, P. Sarriguren, L. M. Robledo and J. E. Garcia-Ramos.
Mean field study of structural changes in Pt isotopes with the Gogny interaction.
Physical Review C **81**, 024310 (2010).
61. R. Rodriguez-Guzman, P. Sarriguren, L. M. Robledo and S. Perez-Martin.
Charge radii and structural evolution in Sr, Zr, and Mo isotopes.
Physics Letters B **691**, 202 82010).
62. S. M. A. Rombouts, J. Dukelsky and G. Ortiz.
Quantum phase diagram of the integrable $px+ipy$ fermionic superfluid.
Physical Review B **82**, 224510 (2010).
63. C. Romero-Redondo, E. Garrido, P. Barletta, A. Kievsky and M. Viviani.
Accurate calculation of phase shifts. Application to three-body reactions with the adiabatic expansion method.
Nuclear Physics A **834**, 799c-801c (2010).
64. P. Sarriguren and J. Pereira.
Beta-decay properties of Zr and Mo neutron-rich isotopes.
Physical Review C **81**, 064314 (2010).
65. P. Sarriguren, R.R. Rodriguez-Guzman and L. M. Robledo.
Microscopic description of shape evolution in medium-mass nuclei.
XVIII International School on Nuclear Physics, Neutron Physics and Applications.
Journal of Physics Conference Series Vol. **205**, 012024 (2010).
IOP Publishing (UK)
66. M. L. Senent and M. Hochlaf.
Ab initio characterization of C_4 , C_4H and C_4H^+
Astrophysical Journal **708**, 1452-1458 (2010).
67. M. L. Senent, R. Ruiz, M. Villa, and R. Domínguez-Gómez.
CCSD(T) study of the far-infrared spectrum of ethyl-methyl-ether isotopic varieties.
Chemical Physics **368**, 87-92 (2010).
68. M. L. Senent and R. Dominguez-Gomez.
Spectroscopic parameters of SiC_4
Chemical Physics Letters **501**, 25-29 (2010).
69. T. Ulbricht, R. A. Molina, R. Thomale and P. Schmitteckert.
Color-charge separation in trapped $SU(3)$ fermionic atoms.
Physical Review A **82**, 011603(R) (2010).

6.1.2 DPTO. DE FÍSICA NUCLEAR Y FÍSICA ESTADÍSTICA / NUCLEAR PHYSICS AND STATISTICAL PHYSICS

70. N. Adimi, R. Dominguez-Reyes, M. Alcorta, A. Bey, B. Blank, M.J.G. Borge, F. De Oliveira Santos, C. Dossat, H.O.U. Fynbo, J. Giovinazzo, H.H. Knudsen, M. Madurga, I. Matea, A. Perea, K. Sümmerer, O. Tengblad and J.-C. Thomas.
Detailed β -decay study of ^{33}Ar .
Physical Review C **81**, 024311 -1-14 (2010).

71. L. Atanasova, D.L. Balabanski, S.K. Chamoli, M. Hass, G.S. Simpson, D. Bazzacco, F. Becker, P. Bednarczyk, G. Benzoni, N. Blasi, A. Blazhev, A. Bracco, C. Brandau, L. Caceres, F. Camera, F.C.L. Crespi, P. Detistov, P. Doornenbal, C. Fahlander, E. Farnea, G. Georgiev, J. Gerl, K.A. Gladnishki, M. Grska, J. Grebosz, R. Hoischen, G. Ilie, M. Ionescu-Bujor, A. Iordachescu, A. Jungclaus, G. Li Bianco, M. Kmiecik, I. Kojouharov, N. Kurz, S. Lakshmi, R.L. Lozeva, A. Maj, D. Montanari, G. Neyens, M. Pfützner, S. Pietri, Zs. Podolyk, W. Prokopowicz, D. Rudolph, G. Rusev, T.R. Saito, A. Saltarelli, H. Schaffner, R. Schwengner, S. Tashenov, J.J. Valiente-Dobon, N. Vermeulen, J. Walker, E. Werner-Malento, O. Wieland, H.J. Wollersheim, H. Grawe and M. Hjorth-Jensen.
g-factor measurements at RISING: The cases of ^{127}Sn and ^{128}Sn .
EPL-Europhys Lett **91**, 42001-1/ 42001-6 (2010).
72. F.J. Bermejo and L. Letamendia.
An optical Brillouin study of a re-entrant binary liquid mixture.
NATO Science for Peace and Security Series A-Chemistry and Biology **1**,153-166 (2010).
73. B. Blank, A. bey, I. Matea, J. Souin, L. Audirac, M.J.G. Borge, G. Cachel, F. Delalee, C.E. Demonchy, R. Dominguez Reyes, L. M. Fraile, J. Giovinazzo, Tran Trong Hui, J. Huikari, D. Lunney, F. Munoz, J.-L. Pedroza, C. Plaisir, L. Serani, S. Sturn, O. Tengblad and Wenander.
Precise half-life measurements for ^{38}Ca and ^{39}Ca .
European Physical Journal A **44**, 363-372 (2010).
74. J. A. Briz, M. J. G. Borge, A. Maira, A. Perea, O. Tengblad, J. Agramunt, A. Algora, M. E. Estevez Aguado, E. Nácher, B. Rubio, L. M. Fraile, A. Deo, G. Farrelly, W. Gelletly and Z. Podolyak.
Conversion coefficients of the isomeric state in Br-72
Proceedings of the “International Scientific Meeting on Nuclear Physics: Basic Concepts in Nuclear Physics: Theory, Experiments, and Applications”.
AIP Conference Proceedings 1231 (2010) 203-204.
75. C. Cabrillo, E. Enciso, M. J. Capitán, A. Cabañas, M. J. Torralvo, J. Álvarez and F. J. Bermejo.
A novel real space scattering theory: efficient characterization of colloidal crystals.
XIV International Conference on Small-Angle Scattering (SAS09).
Journal of Physics: Conference Series 247 (2010) 012012.
76. M. Carmona-Gallardo, M. J. G. Borge, J. A. Briz, V. Gugliemina, A. Perea, O. Tengblad and M. Turrión.
A High Resolution Phoswich Detector: $\text{LaBr}_3(\text{Ce})$ Coupled With $\text{LaCl}_3(\text{Ce})$.
Proceedings of the “International Scientific Meeting on Nuclear Physics: Basic Concepts in Nuclear Physics: Theory, Experiments, and Applications”.
AIP Conference Proceedings 1231 (2010) 205-206.
77. D. Cortina-Gil, C. Rodriguez-Tajes, H. Alvarez-Pol, E. Benjamim, J. Benlliure, M.J.G Borge, M. Caamano, E. Casarejos, A. Chatillon, K. Eppinger, T. Faestermann, M. Gascon, H. Geissel, R. Gernhauser, B. Jonson, R. Kanungo, R. Krucken, T. Kurtukian, P. Maierbeck, T. Nilsson, C. Nocciforo, C. Pascual-Izarra, A. Perea, D. Perez-Loureiro, A. Prochazka, H. Simon, K. Suemmerer, O. Tengblad, H. Weick, M. Zhukov.
One-neutron knockout of n-rich Ne isotopes at relativistic energies.
Nuclear Physics A **834**, 485c-487c, (2010).
78. M. Cubero, M.J.G. Borge, L. Acosta, M. Alcorta, M.A.G. Alvarez, C. Diget, D. Galaviz, J.P. Fernandez-Garcia, J. Gomez-Camacho, J.A. Lay, M. Madurga, I. Martel, A.M. Moro, I. Mukha, A.M. Sanchez-Benitez, A. Shorter, O. Tengblad, P. Walden.
Dynamic studies of Li-11 and its core Li-9 on Pb-208 near the Coulomb barrier.
AIP Conference Proceedings **1231**, 211-212 (2010).
79. A.Y. Deo, Zs. Podolyák, P.M. Walker, A. Algora, B. Rubio, J. Agramunt, L.M. Fraile, N. Al-Dahan, N. Alkhomashi, J.A. Briz, E. Estevez, G. Farrelly, W. Gelletly, A. Herlert, U. Köster, A. Maira, and S. Singla.
Structures of ^{201}Po and ^{205}Rn from EC/ β^+ -decay studies.
Physical Review C **81**, 024322-1/ 024322-8 (2010).
80. A. Di Pietro, G. Randisi, V. Scuderi, L. Acosta, F. Amorini, M.J.G. Borge, P. Figuera, M. Fisichella, L. M. Fraile, J. Gomez-Camacho, H. Jeppesen, M. Lattuada, I. Martel, M. Milin, A. Musumarra, M. Papa, M.G. Pellegriti, F. Perez-Bernal, R. Raabe, F. Rizzo, D. Santonocito, G. Scalia, O. Tengblad, D. Torresi, A. Maira Vidal, D. Voulot, F. Wenander, and M. Zadro.

81. R. Dominguez-Reyes, N. Adimi, M. Alcorta, B. Blank, M.J.G. Borge, M. Madurga, I. Matea, A. Perea, O. Tengblad, M. Turrión.
Ar-33, Ar-32 beta-delayed particle and gamma emission.
AIP Conference Proceedings **1231**, 177-178 (2010).
82. J.P. Fernandez-Garcia, M. Rodriguez-Gallardo, M. A. G. Alvarez, A. M. Moro.
The He-6 Optical Potential at energies around the Coulomb barrier.
AIP Conference Proceedings **1231**, 221-222 (2010).
83. S. Hyldegaard, M. Alcorta, B. Bastin, M.J.G. Borge, R. Boutami, S. Brandenburg, J. Büscher, P. Dendooven, C.Aa Diget, P. Van Duppen, T. Eronen, S. Fox, L.M. Fraile, B.R. Fulton, H.O.U. Fynbo, J. Huikari, M. Huyse, H. Jeppesen, A. Jokinen, B. Jonson, K. Jungmann, A. Kankainen, O. Kirsebom, M. Madurga, I. Moore, A. Nieminen, T. Nilsson, G. Nyman, G.J.G. Onderwater, H. Penttilä, K. Peräjärvi, R. Raabe, K. Riisager, S. Rinta-Anttila, A. Rogachevskiy, A. Saastamoinen, M. Sohani, O. Tengblad, E. Traykov, Y. Wang, K. Wilhelmsen H. W. Wilschut and J. Äystö.
R-matrix analysis of the β decays of ^{12}N and ^{12}B .
Physical Review C **81**, 024303-1-10 (2010).
84. H.T. Johansson, Yu Aksyutina, T. Aumann, K. Boretzky, M.J.G. Borge, A. Chatillon, L.V. Chulkov, D. Cortina-Gil, U. Datta Pramanik, H. Emling, C. Forssén, H.O.U. Fynbo, H. Geissel, G. Ickert, K.L. Jones, B. Jonson, R. Kulesa, C. Langer, M. Lantz, T. Le Bleis, K. Mahata, M. Meister, T. Nilsson, G. Nyman, R. Palit, S. Paschalis, W. Prokopowicz, R. Reifarth, A. Richter, K. Riisager, G. Schrieder, H. Simon, K. Sümmerer, O. Tengblad, H. Weick and M.V. Zhukov.
The unbound isotopes $^{9,10}\text{He}$.
Nuclear Physics A **842**, 15-32 (2010).
85. H. T. Johansson, Yu Aksyutina, T. Aumann, K. Boretzky, M.J.G. Borge, A. Chatillon, L.V. Chulkov, D. Cortina-Gil, U. Datta Pramanik, H. Emling, C. Forssén, H.O.U. Fynbo, H. Geissel, G. Ickert, K.L. Jones, B. Jonson, R. Kulesa, C. Langer, M. Lantz, T. Le Bleis, K. Mahata, M. Meister, T. Nilsson, G. Nyman, R. Palit, S. Paschalis, W. Prokopowicz, R. Reifarth, A. Richter, K. Riisager, G. Schrieder, H. Simon, K. Sümmerer, O. Tengblad, H. Weick and M.V. Zhukov.
Three-body correlations in the decay of ^{10}He and ^{13}Li .
Nuclear Physics A **847**, 66-88 (2010).
86. O.S. Kirsebom, M. Alcorta, M.J.G. Borge, M. Cubero, C.A. Diget, R. Dominguez-Reyes, L. M. Fraile, B.R. Fulton, H.O.U. Fynbo, S. Hyldegaard, B. Jonson, M. Madurga, A. Muñoz Martin, T. Nilsson, G. Nyman, A. Perea, K. Riisager and O. Tengblad.
Breakup of ^{12}C resonances into three α particles.
Physical Review C **81**, 064313-1-9 (2010).
87. A.I. Krivchikov, O.A. Korolyuk, I.V. Sharapova, O.O. Romantsova, F.J. Bermejo, C. Cabrillo, I. Bustinduy, M.A. Gonzalez.
Thermal conductivity of metastable states of simple alcohols.
NATO Science for Peace and Security Series A-Chemistry and Biology **1**, 349-358 (2010).
88. A. Lépine-Szily, R. Lichtenthäler, V. Guimarães, D.R. Mendes Jr., P.N. de Faria, A. Barioni, E.A. Benjamim, K.C.C. Pires, V. Morcelle, R.P. Condori, M.C. Morais, P. Descouvemont, A.M. Moro, M. Rodríguez Gallardo, M.M. Assunção, J.A. Alcantara Nunez, J.M.B. Shorto, J.C. Zamora, E. Leistenschneider, C.E.F. Lima.
Scientific program of the Radioactive Ion Beams Facility in Brasil (RIBRAS).
Nuclear Physics A **834**, 491c-494c (2010).
89. M. Majer, R. Raabe, M. Milin, C. Angulo, J. Cabrera, E. Casarejos, J.L. Charvet, D. Escrig, A. Gillibert, Th. Keutgen, V. Lapoux, L. Nalpas, A. Ninane, A. Obertelli, N.A. Orr, F. Skaza, J.L. Sida, S.I. Sidorchuk, D. Smirnov and R. Wolski.
 $^6\text{He} + ^9\text{Be}$ reactions at 16.8 MeV.
European Physical Journal A **43**, 153-158 (2010).

90. V. Modamio, A. Jungclaus, A. Algora, D. Bazzacco, D. Escrig, L. M. Fraile, S. Lenzi, N. Marginean, T. Martinez, D.R. Napoli, R. Schwengner and C.A. Ur.
New high-spin isomer and quasiparticle-vibration coupling in ^{187}Ir .
Physical Review C **81**, 054304-1/ 054304-13 (2010).
91. J.B. Muñoz.
New advances in neutrinoless double beta decay matrix elements.
AIP Conference Proceedings **1265**, 340-346 (2010).
92. F. Naqvi, M. Gorska, L. Caceres, A. Jungclaus, M. Pfützner, H. Grawe, F. Nowacki, K. Sieja, S. Pietri, E. Werner-Malento, P.H. Regan, D. Rudolph, Z. Podolyak, J. Jolie, K. Andgren, T. Beck, P. Bednarczyk, J. Benlliure, G. Benzoni, A.M. Bruce, E. Casarejos, B. Cederwall, F.C.L. Crespi, P. Detistov, Zs. Dombradi, P. Doornenbal, H. Geissel, J. Gerl, J. Grebosz, B. Hadinia, M. Hellström, R. Hoischen, G. Ilie, A. Khaplanov, I. Kojouharov, M. Kmiecik, N. Kurz, S. Lalkovski, A. Maj, S. Mandal, V. Modamio, F. Montes, S. Myalski, W. Prokopowicz, P. Reiter, H. Schaffner, G. Simpson, D. Sohler, S.J. Steer, S. Tashenov, J. Walker, O. Wieland and H.J. Wollersheim.
Isomer spectroscopy of ^{127}Cd .
Physical Review C **82**, 034323-1/034323-5 (2010).
93. L.C. Pardo, M. Rovira-Esteve, J.L. Tamarit, N. Veglio, F.J. Bermejo, G.J. Cuello.
A procedure to quantify the short range order of disordered phases.
NATO Science for Peace and Security Series A-Chemistry and Biology **1**, 79-91(2010).
94. C. Rodríguez-Tajes, D. Cortina-Gil, H. Álvarez-Pol, T. Aumann, E. Benjamin, J. Benlliure, M.J.G. Borge, M. Caamaño, E. Casarejos, A. Chatillon, K. Eppinger, T. Faestermann, M. Gascón, H. Geissel, R. Gernhäuser, B. Jonson, R. Kanungo, R. Krücken, T. Kurtukian, K. Larsson, P. Maierbeck, T. Nilsson, C. Nociforo, C. Pascual-Izarra, A. Perea, D. Pérez-Loureiro, A. Prochazka, H. Simon, K. Sümmerer, O. Tengblad, H. Weick, M. Winkler and M. Zhukov.
One-neutron knockout from $^{24-28}\text{Ne}$ isotopes.
Physics Letters B **687**, 26 -30 (2010).
95. C. Rodríguez-Tajes, H. Álvarez-Pol, T. Aumann, E. Benjamin, J. Benlliure, M.J.G. Borge, M. Caamaño, E. Casarejos, A. Chatillon, D. Cortina-Gil, K. Eppinger, T. Faestermann, M. Gascón, H. Geissel, R. Gernhäuser, B. Jonson, R. Kanungo, R. Krücken, T. Kurtukian, K. Larsson, P. Maierbeck, T. Nilsson, C. Nociforo, C. Pascual-Izarra, A. Perea, D. Pérez-Loureiro, A. Prochazka, H. Simon, K. Sümmerer, O. Tengblad, H. Weick, M. Winkler and M. Zhukov.
One-neutron knockout from light neutron rich nuclei at relativistic energies.
Physical Review C **82**, 024305-1/ 024305-9 (2010).
96. M. Rovira-Esteve, L.C. Pardo, J.L. Tamarit, F.J. Bermejo.
Neutron diffraction as a tool to explore the free energy landscape in orientationally disordered phases.
NATO Science for Peace and Security Series A-Chemistry and Biology **1**, 63-77 (2010).
97. V. Scuderi, A. Di Pietro, L. Acosta, F. Amorini, M.J.G. Borge, P. Figuera, M. Fisichella, L. M. Fraile, J. Gomez-Camacho, H. Jeppesen, M. Lattuada, I. Martel, M. Milin, A. Musumarra, M. Papa, M.G. Pellegriti, F. Perez-Bernal, R. Raabe, G. Randisi, F. Rizzo, D. Santonocito, G. Scalia, O. Tengblad, D. Torresi, A. Maira Vidal, D. Voulot, F. Wenander, and M. Zadro.
Structure effects in collisions induced by halo and weakly bound nuclei around the Coulomb barrier.
International Journal of Modern Physics E-Nuclear Physics **19**, 1236-1240 (2010).
98. V. Scuderi, A. Di Pietro, L. Acosta, F. Amorini, M.J.G. Borge, P. Figuera, M. Fisichella, L.M. Fraile, J. Gomez-Camacho, H. Jeppesen, M. Lattuada, I. Martel, M. Milin, A. Musumarra, M. Papa, M.G. Pellegriti, R. Raabe, G. Randisi, F. Rizzo, D. Santonocito, E.M.R. Sanchez, G. Scalia, O. Tengblad, D. Torresi, A.M. Vidal, M. Zadro.
Study of reaction mechanisms for Be-9, Be-10, Be-11+Zn-64 systems around the Coulomb barrier.
AIP Conference Proceedings **1231**, 191-192 (2010).
99. I.V. Sharapova, A.I. Krivchikov, O.A. Korolyuk, A. Jezowski, M. Rovira-Esteve, J.Ll. Tamarit, L.C. Pardo, M.D. Ruiz-Martin, F.J. Bermejo.
Disorder effects on heat transport properties of orientationally disordered crystals.
Physical Review B **81**, 094205 (2010).

100. T. Steinhardt, J. Eberth, O. Thelen, H. Schnare, R. Schwengner, C. Plettner, L. Käubler, F. Döna, A. Algora, G. de Angelis, A. Gadea, D.R. Napoli, M. Hausmann, A. Jungclaus, K.P. Lieb, G.A. Müller, D.G. Jenkins, R. Wadsworth and A.N. Wilson.
Non-termination of yrast bands at maximum configuration spin in ^{73}Kr .
Physical Review C **81**, 054307-1/ 054307-7 (2010).
101. O. Tengblad.
NUSTAR and the status of the R3B project at FAIR.
PRAMANA-JOURNAL OF PHYSICS **75**, 355-361 (2010).
102. Z.M. Wang, R. Chapman, X. Liang, F. Haas, F. Azaiez, B. Behera, M. Burns, E. Caurier, L. Corradi, D. Curien, A.N. Deacon, Zs. Dombradi, E. Farnea, E. Fioretto, A. Gadea, A. Hodsdon, F. Ibrahim, A. Jungclaus, K. Keyes, V. Kumar, A. Latina, S. Lunardi, N. Marginean, G. Montagnoli, D. Napoli, F. Nowacki, J. Ollier, D. O'Donnell, A. Papenberg, G. Pollaro, M.-D. Salsac, F. Scarlassara, J.F. Smith, K.M. Spohr, M. Stanoiu, A.M. Stefanini, S. Szilner, M. Trotta and D. Verney.
 γ -ray spectroscopy of neutron-rich ^{40}S .
Physical Review C **81**, 054305-1/ 054305-7 (2010).
103. Z. M. Wang, R. Chapman, X. Liang, F. Haas, M. Bouhelal, F. Azaiez, B. Behera, M. Burns, E. Caurier, L. Corradi, D. Curien, A.N. Deacon, Zs. Dombradi, E. Farnea, E. Fioretto, A. Gadea, A. Hodsdon, F. Ibrahim, A. Jungclaus, K. Keyes, V. Kumar, A. Latina, N. Marginean, G. Montagnoli, D.R. Napoli, F. Nowacki, J. Ollier, D. O'Donnell, A. Papenberg, G. Pollaro, M.-D. Salsac, F. Scarlassara, J.F. Smith, K.M. Spohr, M. Stanoiu, A.M. Stefanini, S. Szilner, M. Trotta and D. Verney.
Intruder negative-parity states of neutron-rich ^{33}Si .
Physical Review C **81**, 064301-1/ 064301-7 (2010).

6.1.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS

104. G. A. Amaral, A. Arregui, L. Rubio-Lago, J. D. Rodríguez and L. Bañares.
Imaging the radical channel in acetaldehyde photodissociation: Competing mechanisms at energies close to the triplet exit barrier.
Journal of Chemical Physics **133**, 064303 (2010).
105. J. L. Doménech, R.Z. Martínez, Á. Ramos, D. Bermejo.
Direct determination of state-to-state rotational energy transfer rate constants via a Raman-Raman double resonance technique: ortho-acetylene in $v_2 = 1$ at 155 K.
Journal of Chemical Physics. **132**, 154303 (2010).
106. O. Gálvez, B. Maté, V. J. Herrero and R. Escibano.
Ammonium and formate ions in interstellar ice analogs.
Astrophysical Journal **724**, 539 (2010).
107. P.C. Gómez, O. Gálvez, R.G. Mosteo, C. Puzzarini and R. Escibano.
Clusters of atmospheric relevance: $\text{H}_2\text{O}/\text{CH}_4/\text{HNO}_3$. Prediction of IR&MW spectra.
Physical Chemistry Chemical Physics **12**, 4617 (2010).
108. T. Havermeier, T. Jahnke, K. Kreidi, R. Wallauer, S. Voss, M. Schöffler, S. Schössler, L. Foucar, N. Neumann, J. Titze, H. Sann, M. Kühnel, J. Voigtsberger, J. H. Morilla, W. Schöllkopf, H. Schmidt-Böcking, R. E. Grisenti, and R. Dörner.
Interatomic Coulombic Decay following Photoionization of the Helium Dimer: Observation of Vibrational Structure.
Physical Review Letters **104**, 133401 (2010).
109. V.J. Herrero, O. Gálvez, B. Maté and R. Escibano.
Interaction of CH_4 and H_2O in ice mixtures.
Physical Chemistry Chemical Physics **12**, 3164 (2010).
110. P. G. Jambrina, J. M. Alvarino, F. J. Aoiz, Victor J. Herrero and Vicente Sáez-Rábanos.
Reaction dynamics of the $\text{D}^+ + \text{H}_2$ system. A comparison of theoretical approaches.
Physical Chemistry Chemical Physics **12**, 12591 (2010).

111. F. Marquez-Linares, V. Lopez, C. Morant, R. Roque-Malherbe, C. Domingo, E. Elizalde, F. Zamora.
Structure and Characterization of Vertically Aligned Single-Walled Carbon Nanotube Bundles.
Journal of Nanomaterials Volume 2010, Article ID 189214, 7 pages.
112. I. Méndez, I. Tanarro and V. J. Herrero.
On the ionic chemistry in DC cold plasmas of H₂ with Ar.
Physical Chemistry Chemical Physics **12**, 4239 (2010).
113. J. H. Morilla, J. M. Fernández, G. Tejeda, and S. Montero.
The onset of molecular condensation: Hydrogen.
Physical Chemistry Chemical Physics **12**, 12060-12064 (2010).
114. J. Ortigoso, M. Rodriguez, J. Santos, A. Karpati and V. Szalay.
Long-lasting molecular alignment: fact or fiction?
Journal of Chemical Physics **132**, 074105 (2010).
115. M. Oujja, R. de Nalda, M. López-Arias, R. Torres, J. P. Marangos, and M. Castillejo.
CaF₂ ablation plumes as a source of CaF molecules for armonic generation.
Physical Review A **81**, 043841 (2010).
116. M. Oujja, P. Pouli, C. Domingo, C. Fotakis, M. Castillejo.
Analytical Spectroscopic Investigation of Wavelength and Pulse Duration Effects on Laser-Induced Changes of Egg-Yolk-Based Tempera Paints.
Applied Spectroscopy **64**, 528-536 (2010).
117. L. F. Pacios and O. Gálvez.
Active Site, Catalytic Cycle, and Iodination Reactions of Vanadium Iodoperoxidase. A Computational Study.
Journal of Chemical Theory and Computation **6**, 1738 (2010).
118. M. Quintanilla, E. Martín Rodríguez, E. Cantelar, F. Cussó, C. Domingo.
Micro-Raman characterization of Zn-diffused channel waveguides in Tm³⁺:LiNbO₃.
Optics Express **18**, 5449-5458 (2010).
119. A. Ramos, G. Tejeda, J. M. Fernández, S. Montero.
Non-equilibrium processes in supersonic jets of N₂, H₂, and N₂+H₂ mixtures. II. Shock waves.
Journal of Physical Chemistry A **114**, 7761-7768 (2010).
120. M. F. Romero, M. M. Sanz, I. Tanarro, A. Jiménez, E. Muñoz.
Plasma diagnostics and device properties of AlGaIn/GaN HEMT passivated with SiN deposited by plasma enhanced chemical vapour deposition (PECVD).
Journal of Physics D-Applied Physics **43**, 495202 (2010).
121. M. Sanz, M. Walczak, M. Oujja, C. Domingo, A. Klini, E.L. Papadopoulou, C. Fotakis, M. Castillejo.
Femtosecond laser deposition of TiO₂ by laser induced forward transfer.
Thin Solid Films **518**, 5525–5529 (2010).

PUBLICATIONS IN COMMON WITH THE EVPM DEPARTMENT

122. C. Domingo, E. del Puerto, S. Sanchez-Cortes, J.V. García-Ramos.
SERS of Insoluble Synthetic Organic Pigments Employing Calixarenes as Dispersive Cavitands: Application to Quinacridone Quinone.
AIP Conf. Procc. **1267**, 143-144 (2010).
123. L. Guerrini, J.V. Garcia-Ramos, C. Domingo, S. Sanchez-Cortes.
Ultrathin silver-coated gold nanoparticles as suitable substrate for surface-enhanced Raman scattering.
Journal of Raman Spectroscopy **41**, 508-515 (2010).
124. L. Guerrini, I. Izquierdo-Lorenzo, R. Rodriguez-Oliveros, J. A. Sanchez-Gil, S. Sanchez-Cortes, J.V. Garcia-Ramos, C. Domingo.
 α,ω -Aliphatic Diamines as Molecular Linkers for Engineering Ag Nanoparticle Clusters: Tuning of the Interparticle Distance and Sensing Application.

Plasmonics **5**, 273-286 (2010).

125. Z. Jurasekova, E. del Puerto, G. Bruno, J. V. García-Ramos, S. Sanchez-Cortes, C. Domingo.
Extractionless non-hydrolysis Surface-Enhanced Raman Spectroscopic detection of historical mordant dyes on textil fibers.
Journal of Raman Spectroscopy **41**, 1165-1171 (2010).
126. S. Sanchez-Cortes, I. Izquierdo-Lorenzo, J. V. Garcia-Ramos, C. Domingo.
Vibrational Characterization and Surface-Enhanced Raman Scattering Detection of Beta-Agonists used in Sport Doping.
AIP Conf. Procc. 1267, 210-211 (2010).
127. P. Sevilla, R. de Llanos, C. Domingo, S. Sanchez-Cortes, J.V. Garcia-Ramos.
SERS+MEF of the antitumoral drug emodin adsorbed on silver nanoparticles.
Plasmonics in Biology and Medicine VII, T. Vo-Dinh, J. R. Lakowicz (Eds.), Proc. of SPIE Vol 7577, 757714_1-5, SPIE (2010).

6.1.4 DPTO. DE ESPECTROSCOPIA VIBRACIONAL Y PROCESOS MULTIFOTÓNICOS / VIBRATIONAL SPECTROSCOPY AND MULTIPHOTON PROCESSES

128. E. Aliaga, C. Garrido, P. Leyton, G. Diaz F., T. Aguayo, E. Clavijo, M. M. Campos-Vallette, and S. Sanchez-Cortes.
SERS and theoretical studies of arginine.
Spectrochimica Acta A **76**, 458-463 (2010).
129. J. J. Camacho, M. Santos, L. Díaz, L. J. Juan and J.M.L. Poyato.
Spectroscopy study of air plasma induced by IR CO2 laser pulses.
Applied Physics A **99**, 159-175 (2010).
130. J. J. Camacho, L. Díaz, M. Santos, L. J. Juan, and J.M.L. Poyato.
Time-resolved optical emission spectroscopy of laser-produced air plasma.
Journal of Applied Physics **107**, 083306-pp9, (2010).
131. P. Carletti, M. L. Roldán, O. Francioso, S. Nardi, and S. Sanchez-Cortes
Structural characterization of humic-like substances with conventional and surface-enhanced spectroscopic techniques.
Journal of Molecular Structure **982**, 169-175 (2010).
132. P. Carmona and M. Molina.
Interactions of protein and nucleic acid components of hepatitis C virus as revealed by Fourier transform infrared spectroscopy.
Biochemistry **49**, 4724-4731 (2010).
133. P.M. Carmona-Quiroga, S. Martínez-Ramírez, S. Sanchez-Cortes, M. Oujja, M. Castillejo, M.T. Blanco-Varela.
Effectiveness of anti-graffiti treatments in connection with penetration depth determined by different techniques.
Journal of Cultural Heritage **24**, 297-303 (2010).
134. C. Garrido, A. E. Aliaga, J. S. Gomez-Jeria, R. E. Clavijo, M. M. Campos-Vallette, S. Sanchez-Cortes.
Adsorption of oligopeptides on Ag nanoparticles. A surface-enhanced Raman scattering and theoretical study.
Journal of Raman Spectroscopy **41**, 1149-1155 (2010).
135. V. Giannini, A. Berrier, S.A. Maier, J.A. Sánchez-Gil, and J. Gómez Rivas.
Scattering efficiency and near field enhancement of active semiconductor plasmonic antennas at terahertz frequencies.
Optics Express **18**, 2797-2807 (2010).
136. V. Giannini, R. Rodriguez-Oliveros, and J.A. Sánchez-Gil.

- Surface plasmon resonances of metallic nanostars/nanoflowers for surface-enhanced Raman scattering*
Plasmonics **5**, 99-104 (2010).
137. I. Iriepa, J. Bellanato, E. Gálvez and B. Gil-Alberdi.
Synthesis, structural, conformational and pharmacological study of some amides derived from 3-methyl-2,4-diphenyl-3-azabicyclo [3.3.1]nonan-9 α -amine.
Journal of Molecular Structure **976**, 190-195 (2010).
 138. I. Izquierdo-Lorenzo, S. Sanchez-Cortes, J. V. Garcia-Ramos
Adsorption of Beta-Adrenergic Agonists Used in Sport Doping on Metal Nanoparticles: A Detection Study Based on Surface-Enhanced Raman Scattering.
Langmuir **26**, 14663-14670 (2010).
 139. M. R. López-Ramírez, S. Sanchez-Cortes, M. Pérez-Méndez, G. Blanch.
Trans-cis isomerisation of the carotenoid lycopene upon complexation with cholesteric polyester carriers investigated by Raman spectroscopy and density functional theory.
Journal of Raman Spectroscopy **41**, 1170-1177 (2010).
 140. I. López-Tocón, J. C. Otero, J. F. Arenas, J. V. Garcia-Ramos, S. Sanchez-Cortes.
Trace Detection of Triphenylene by Surface Enhanced Raman Spectroscopy Using Functionalized Silver Nanoparticles with Bis-Acrinium Lucigenine.
Langmuir **26**, 6977-6981 (2010).
 141. R. Paniagua-Domínguez, J. A. Sánchez-Gil, P. Albella, J. M. Sáiz, F. González, and F. Moreno.
Enhanced backscattering of electromagnetic waves from randomly rough gratings on negative magnetic metamaterials.
Metamaterials **4**, 201–206 (2010).
 142. M. Santos, L. Díaz, J.J. Camacho, J.M.L. Poyato, J. Pola, and T. Kranek.
Laser Induced Breakdown Spectroscopy of Germane Plasma Induced by IR CO Pulsed Laser.
Applied Physics A **99**, 811-821, (2010).
 143. M. Santos, L. Díaz, J.J. Camacho, M. Urbanová, D. Pokorná, J. Šubrt, S. Bakardjieva, Z. Bastl, and J. Pola.
IR laser-induced metal ablation and dielectric breakdown in benzene.
Infrared Physics & Technology **53**, 23-28 (2010).

PUBLICATIONS IN COMMON WITH THE MOLECULAR PHYSICS DEPARTMENT

- C. Domingo, E. del Puerto, S. Sanchez-Cortes, J.V. García-Ramos
SERS of Insoluble Synthetic Organic Pigments Employing Calixarenes as Dispersive Cavitands: Application to Quinacridone Quinone
AIP Conf. Procc. **1267**, 143-144 (2010)
- L. Guerrini, J.V. García-Ramos, C. Domingo, and S. Sanchez-Cortes.
Ultrathin Silver coated gold nanoparticles as suitable substrates for surface-enhanced Raman scattering.
Journal of Raman Spectroscopy **41**, 508-515 (2010)
- L. Guerrini, I. Izquierdo-Lorenzo, R. Rodríguez-Oliveros, J.A. Sánchez-Gil, S. Sanchez-Cortes, J.V. García-Ramos, and C. Domingo.
 α,ω -aliphatic diamines as molecular linkers for engineering Ag nanoparticle clusters: tuning of the interparticle distance and sensing application
Plasmonics **5**, 273-286 (2010).
- Z. Jurasekova, E. del Puerto, G. Bruno, J.V. García-Ramos, S. Sanchez-Cortes, and C. Domingo.
Extractionless non-hydrolysis Surface-enhanced Raman spectroscopic detection of historical mordant dyes on textile fibers
Journal of Raman Spectroscopy **41**, 1165-1171 (2010).
- S. Sanchez-Cortes, I. Izquierdo-Lorenzo, J. V. García-Ramos, C. Domingo
Vibrational Characterization and Surface-Enhanced Raman Scattering Detection of Beta-Agonists used in Sport Doping
AIP Conf. Procc. **1267**, 210-211 (2010)

P. Sevilla, R. de Llanos, C. Domingo, S. Sanchez-Cortes, J.V. García-Ramos
SERS+MEF of the antitumoral drug emodin adsorbed on silver nanoparticles
 Plasmonics in Biology and Medicine VII, T. Vo-Dinh, J. R. Lakowicz (Eds.), Proc. of SPIE Vol 7577,
 757714_1-5, SPIE (2010)

6.1.5 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

144. R. Adhikari, S.K. Khatri, S. Adhikari, G.H. Michler, F.J. Baltá Calleja.
Microindentation hardness of nanostructured thermoplastic materials.
 Macromolecular Symposia **290**, 166-174 (2010).
145. J.M. Andreu, C. Schaffner-Barbero, S. Huecas, D. Alonso, M.L. Lopez-Rodriguez, L.B. Ruiz-Avila, R. Núñez-Ramírez, O. Llorca and A.J. Martín-Galiano.
The antibacterial cell division inhibitor PC190723 is an FtsZ polymer-stabilizing agent that induces filament assembly and condensation
 Journal of Biological Chemistry **285**, 14239-14246 (2010).
146. F. Ania, F.J. Baltá Calleja, S. Henning, D. Khariwala, A. Hiltner, E. Baer.
Study of the multilayered nanostructure and thermal stability of PMMA/PS amorphous films.
 Polymer **51**, 1805-1811 (2010).
147. S. Bouhelal, M.E. Cagiao, A. Bartolotta, G. Di Marco, L. Garrido, D. Benachour, F.J. Baltá Calleja.
On polyethylene chain generation through chemical crosslinking of isotactic polypropylene.
 Journal of Applied Polymer Science **116**(1), 394-403 (2010).
148. S. Bouhelal, M.E. Cagiao, D. Benachour, B. Djellouli, L. Rong, B.S. Hsiao, F.J. Baltá Calleja.
SAXS study of reversibly crosslinked isotactic polypropylene/clay nanocomposites.
 Journal of Applied Polymer Science **117**, 3262-3270 (2010).
149. S. Bouhelal, M.E. Cagiao, S. Khellaf, H. Tabet, D. Benachour, F.J. Baltá Calleja.
Nanostructure and micromechanical properties of reversibly crosslinked isotactic polypropylene/clay composites.
 Journal of Applied Polymer Science **115**(5), 2654-2662 (2010).
150. M.E. Cagiao, P. Buzin, H.R. Kricheldorf, S.S. Funari, F.J. Baltá Calleja.
Micromechanical behavior of biodegradable polyesters relating to nanostructure.
 Journal of Applied Polymer Science **117**, 2591-2596 (2010)
151. J. Carretero-González, T.A. Ezquerra, A. Amnuaypornsi, S. Toki, R. Verdejo, A. Sanz, J. Sakdapipanich, B.S. Hsiao and M.A. López-Manchado.
Molecular dynamics of natural rubber as revealed by dielectric spectroscopy: The role of natural cross-linking.
 Soft Matter **6**(15), 3636-3642 (2010).
152. I. Cuesta, R. Núñez-Ramírez, S.H.W Scheres, D. Gai, X.S. Chen, E. Fanning, J.M. Carazo.
Conformational rearrangements of SV40 large T antigen during early replication events.
 Journal of Molecular Biology **397**, 1276-1286 (2010).
153. A. Flores, C. Arribas, F. Fauth, D. Khariwala, A. Hiltner, E. Baer, F.J. Baltá Calleja, F. Ania.
Finite size effects in multilayered polymer systems: development of PET lamellae under physical confinement.
 Polymer **51**(20), 4530-4539 (2010).
154. M.C. García-Gutiérrez, A. Linares, J.J. Hernández, D.R. Rueda, T.A. Ezquerra, P. Poza and R.J. Davies.
Confinement-Induced One-Dimensional Ferroelectric Polymer Arrays.
 Nano Letters **10**(4), 1472-1476 (2010).
155. T. Gómez del Río, P. Poza, J. Rodríguez, M.C. García-Gutiérrez, J.J. Hernández and T.A. Ezquerra.
Influence of single walled carbon nanotubes on the effective elastic constants of poly(ethylene terephthalate).
 Composites Science and Technology **70**(2) 284-290 (2010).

156. L. González-García, A. Barranco, A. Muñoz Páez, A.R. González-Elípe, M.C. García-Gutiérrez, J.J. Hernández, D.R. Rueda, T.A. Ezquerro and D. Babonneau.
Structure of Glancing Incidence Deposited TiO₂ Thin Films as Revealed by Grazing Incidence Small-Angle X-ray Scattering.
CHEMPHYSICHEM **11**(10), 2205-2208, (2010).
157. A. Hellati, D. Benachour, M. E. Cagiao, S. Boufassa, F. J. Baltá Calleja.
The role of a compatibilizer on the structure and micromechanical properties of recycled PET/polyolefin blends with clay.
Journal of Applied Polymer Science **118**, 1278–1287 (2010).
158. J.J. Hernández, D.R. Rueda, M.C. García-Gutiérrez, A. Nogales, T.A. Ezquerro, M. Soccio, N. Lotti and A. Munari.
Structure and morphology of thin films of linear aliphatic polyesters prepared by spin-coating.
Langmuir **26**(13), 10731–10737 (2010).
159. M. Hernández, J. Carretero-González, R. Verdejo, T.A. Ezquerro and M.A. López-Manchado.
Molecular Dynamics of Natural Rubber/Layered Silicate Nanocomposites As Studied by Dielectric Relaxation Spectroscopy.
Macromolecules **43**(2) 643-651 (2010).
160. R. Hernández, J. Sacristán, A. Nogales, M. Fernández, T.A. Ezquerro and C. Mijangos.
Structure and viscoelastic properties of hybrid ferrogels with iron oxide nanoparticles synthesized in situ.
Soft Matter **6**(16), 3910-3917 (2010).
161. A. Linares, A. Nogales, A. Sanz, T.A. Ezquerro, M. Pieruccini.
Restricted dynamics in oriented semicrystalline polymers: Poly(vinylidene fluoride).
Physical Review E **82**(3) Art. no. 031802 (2010).
162. M. Muñoz-Úbeda, A. Rodríguez-Pulido, A. Nogales, A. Martín-Molina, E. Aicart, E. Junquera.
Effect of Lipid Composition on the Structure and Theoretical Phase Diagrams of DC-Chol/DOPE-DNA Lipoplexes.
Biomacromolecules **11** (12), 3332–3340 (2010).
163. C. Navio, M.J. Capitán, J. Alvarez, R. Miranda, F. Yndurain.
Formation of a non-magnetic metallic iron nitride layer on bcc Fe(100)
New Journal of Physics **12**, 073004 (2010).
164. M.D. Ninago, A.J. Satti, A.E. Ciolino, E.M. Vallés, M.A. Villar, D.A. Vega, A. Sanz, A. Nogales and D.R. Rueda.
*Synthesis and Morphology of Model PS-*b*-PDMS Copolymers.*
Journal of Polymer Science Part A: Polymer Chemistry **48**(14), 3119-3127 (2010).
165. A. Nogales, C. García, J. Pérez, P. Callow, T.A. Ezquerro and J. González-Rodríguez.
Three-dimensional model of human platelet integrin [α IIb β 3] in solution obtained by small angle neutron scattering (SANS).
Journal of Biological Chemistry **285**, 1023-1031 (2010).
166. M. Pieruccini and A. Flores.
The influence of crystal formation on segmental mobility in polymers: hints from a statistical mechanical relaxation model”.
Colloid and Polymer Science **288**, 365-376 (2010).
167. J. Ramos, V.L. Cruz, J. Martínez-Salazar, M. Brasse, P. Palma and J. Campora.
Density functional study for the polymerization of ethylene monomer using a new nickel catalyst.
Journal of Polymer Science Part A: Polymer Chemistry **48**, 1160-1165 (2010).
168. D.R. Rueda, J.J. Hernández, M.C. García-Gutiérrez, T.A. Ezquerro, M. Soccio, N. Lotti, A. Munari, J. Perlich, R. Serna.
Flat-On Lamellae in Spin-Coated, Stable Films of Poly(propylene azelate).

- Langmuir, **26**, 17540 (2010).
169. A. Sanz, A. Nogales and T.A. Ezquerro.
Influence of fragility on polymer cold crystallization.
Macromolecules **43**(1) 29-32 (2010).
 170. A. Sanz, T. A. Ezquerro and A. Nogales.
Interplay between amorphous and crystalline domains in semicrystalline polymers by simultaneous SAXS, WAXS and Dielectric Spectroscopy.
IOP Conf. Ser.: Mater. Sci. Eng. **14** 012011(2010).
 171. A. Sanz A, Nogales A, Ezquerro T, Soccio M, Munari A, Lotti N.
Cold Crystallization of Poly(trimethylene terephthalate) as revealed by simultaneous WAXS, SAXS and Dielectric Spectroscopy.
Macromolecules **43**(2) 671-679 (2010).
 172. R.D. Simoes, M.A. Rodriguez-Perez, J.A. De Saja, C.J.L. Constantino.
Thermomechanical characterization of PVDF and P(VDF-TrFE) blends containing corn starch and natural rubber.
Journal of Thermal Analysis and Calorimetry **99**, 621-629 (2010).
 173. H.C. Wong, A. Sanz, J.F. Douglas and J.T. Cabral.
Glass formation and stability of polystyrene-fullerene nanocomposites.
Journal of Molecular Liquids **153**, 79-87 (2010).
 174. T.D. Ziebarth, R. Gonzalez-Soltero, M.M. Makowska-Grzyska, R. Nuñez-Ramírez, J.-M. Carazo and L.S. Kaguni.
Dynamic effects of cofactors and DNA on the oligomeric state of human mitochondrial DNA helicase.
Journal of Biological Chemistry **285**, 14639-14647 (2010).

6.2 PUBLICACIONES EN REVISTAS NO JCR/ISI / NON JCR-ISI PUBLICATIONS

6.2.2. DPTO. DE FÍSICA NUCLEAR Y FÍSICA ESTADÍSTICA / NUCLEAR PHYSICS AND STATISTICAL PHYSICS

1. P. G. Bizzeti, G. De Angelis, R. Orlandi and C. A. Ur.
Correction of the Angular-Correlation Bias in Coincidence γ Spectroscopy
LNL Annual Report **2009**, 3 (2010).
2. E. Farnea, S. Aydin, D. Bazzacco, M. Bellato, D. Bortolato, A. Colombo, J. Chavas, C. Fanin, R. Isocrate, S.M. Lenzi, S. Lunardi, R. Menegazzo, D. Mengoni, P. Molini, G. Montagnoli, R. Peghin, L. Ramina, G. Rampazzo, M. Rebeschini, F. Recchia, F. Scarlassara, C.A. Ur, R. Venturelli, F. Veronese, A. Gadea, G. de Angelis, L. Berti, E. Calore, P. Cocconi, E. Fioretto, D. Conventi, L. Corradi, L. Costa, A. Gottardo, M. Gulmini, G. Maron, C. Michelagnoli, D.R. Napoli, D. Rosso, E. Sahin, A.M. Stefanini, N. Toniolo, J.J. Valiente-Dobón, B. Birkenbach, B. Bruyneel, K. Geibel, H. Hess, P. Reiter, A. Wiens, A. Bracco, S. Brambilla, A. Capsoni, S. Coelli, F. Camera, A. Cortesi, F. Crespi, S. Leoni, B. Million, A. Pullia, F. Tomasi, E. Viscione, F. Zocca, T. Bloch, M. Reese, C. Roeder, D. Bloor, P. Joshi, A. Boston, H. Boston, S. Colosimo, D. Judson, F. Filmer, S. Moon, M. Slee, C. Unsworth, A. Bouty, S. Broussard, A. Lotode, C. Veyssiere, C. Domingo Pardo, T. Habermann, I. Kojouharov, N. Kurtz, E. Merchan, S. Pietri, H. Schaefer, B. Dulny, J. Grebosz, M. Zieblinski, G. Duchene, D. Barrientos, M. Doncel, A. Hernandez, B. Quintana, X. Grave, R. Griffiths, J. Strachan, P. Jones, R. Kempley, R. Orlandi, J. Smith, J. Nyberg, P.A. Soderstrom, A. Robinson, O. Stezowski, G. Suliman and the AGATA and the PRISMA Collaboration.
Commissioning Campaign of the AGATA Demonstrator Array
LNL Annual Report **2009**, 51 (2010).
3. D. Mengoni, D. Bazzacco, M. Bellato, D. Bortolato, E. Farnea, N. Toniolo, F. Recchia, J. J. Valiente-Dobón, A. Gadea, A. Gottardo, B. Birkenbach, T. Bloch, B. Bruyneel, G. de Angelis, F. Filmer, K. Geibel,

H. Hess, S. Lunardi, S. Lenzi, R. Menegazzo, E. Merchan, C. Michelagnoli, S. Moon, D. R. Napoli, J. Nyberg, R. Orlandi, S. Pietri, M. Reese, P. Reiter, A. Robinson, C. Roeder, E. Sahin, M. Slee, J. F. Smith, C. Unsworth, C. A. Ur, A. Wiens, and the AGATA Collaboration.
AGATA Demonstrator at LNL: the coupling to the PRISMA magnetic spectrometer
 LNL Annual Report **2009**, 55 (2010).

4. Christoff Normand and M.J.G. Borge.
Trazando el paisaje nuclear 50 años de historia de la Karlsruher Nuklidkarte.
 Revista. Española de Física **24** (1), 76-80 (2010).
5. E. Sahin, G. de Angelis, A. Gadea, C. Ur, J.J. Valiente-Dobón, S. Aydin, D. Bazzacco, M. Bostan, F. Didierjean, M.N. Erduran, E. Farnea, A. Gottardo, A. Kusoglu, S. Lenzi, S. Lunardi, R. Menegazzo, D. Mengoni, C. Michelagnoli, D.R. Napoli, R. Orlandi, F. Recchia, D.A. Torres.
Study of Neutron-Rich Nuclei around $N=50$ towards ^{78}Ni : a gamma-gamma Thick-Target Experiment with the $^{82}\text{Se} + ^{238}\text{U}$ Reaction
 LNL Annual Report **2009**, 10 (2010).
6. J.J. Valiente-Dobón, A. Gottardo, D. Pellegrini, A. Gadea, D. Bazzacco, B. Birkenbach, T. Bloch, B. Bruyneel, G. de Angelis, E. Farnea, K. Geibel, H. Hess, S. Lunardi, S. Lenzi, D. Mengoni, R. Menegazzo, E. Merchan, C. Michelagnoli, S. Moon, D.R. Napoli, J. Nyberg, R. Orlandi, S. Pietri, F. Recchia, M. Reese, P. Reiter, A. Robinson, C. Roeder, E. Sahin, J. Smith, C.A. Ur, A. Wiens and the AGATA Collaboration.
Kinematical Coincidences of DANTE Coupled to the AGATA Demonstrator in the Multinucleon-transfer Reaction $^{58}\text{Ni} + ^{96}\text{Zr}$
 LNL Annual Report **2009**, 61 (2010).

6.2.3. DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS

7. I. Tanarro.
Plasmas fríos moleculares en el universo y en el laboratorio.
 Revista Española de Física, 24, 16 (2010).

6.2.5 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

8. V.L. Cruz, J. Ramos, J.F. Vega and J. Martínez-Salazar.
Acceso simplificado a infraestructuras de cálculo.
 Revista dixitos, Novas do centro de Supercomputación de Galicia, ISSN: 1576-1924, November 2010.
http://www.cesga.es/component/option,com_docman/task,catalog_view/gid,579/Itemid,13/lang,es/
9. M Pieruccini and A Flores.
The effect of conformational restrictions on the segmental relaxation dynamics of semicrystalline polymer.
 Atti della Accademia Peloritana dei Pericolanti, Vol. LXXXVIII, No. 1, C1A1001001 (2010), ISSN 1825-1242.

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

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

1. M. K. Gaidarov, G. Z. Krumova, P. Sarriguren, A. N. Antonov, M. V. Ivanov and E. Moya de Guerra.
Momentum distributions in medium and heavy exotic nuclei.
 Proc. of the 29th Int. Workshop on Nuclear Theory, Vol. 29, 86 (2010). Heron Press, Sofia (Bulgaria).
 ISSN 1313-2822
2. R. Rodriguez-Guzman, P. Sarriguren and L. M. Robledo.
Microscopic description of ground and onequasiparticle states in neutron rich Sr, Zr and Mo isotopes with the Gogny energy Density Functional.
 Proc. of the 29th Int. Workshop on Nuclear Theory, Vol. 29, 52 (2010). Heron Press, Sofia (Bulgaria).

6.3.3 **DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS**

3. C. Domingo.
Raman techniques applied to Cultural Heritage objects.
Procc. COST D42 WG2 Meeting, Madrid, March 2010, 2pp.
4. R. Escribano, O. Gálvez, B. Mate and V.J. Herrero.
Laboratory models for ices in comet nuclei.
In "Advances in Geosciences", Vol. 19, "Planetary Sciences", Ed. Anil Bhardwaj,
World Scientific Publishing Company, 2010.
ISBN -13 978-981-283-815-5.
ISBN-10 981-283-815-5.
5. R. Escribano and I. Tanarro, Eds.
Spectroscopy of the Atmospheres.
CSIC, Madrid 2010.
ISBN: 978-84-00-09209-2.
6. Víctor J. Herrero.
Introduction to the Atmosphere.
In "Spectroscopy of the Atmospheres", R. Escribano and I. Tanarro Eds.
(CSIC, Madrid 2010).
ISBN: 978-84-00-09209-2.
7. Víctor J. Herrero.
Photochemistry of the Atmosphere.
In "Spectroscopy of the Atmospheres", R. Escribano and I. Tanarro Eds.
(CSIC, Madrid 2010).
ISBN: 978-84-00-09209-2.
8. Isabel Tanarro.
Spectroscopic Techniques.
In "Spectroscopy of the Atmospheres", R. Escribano and I. Tanarro Eds.
(CSIC, Madrid 2010).
ISBN: 978-84-00-09209-2.

BOOKS, PROCEEDINGS AND OTHER PUBLICATIONS IN COMMON WITH EVPM DEPARTMENT

9. C. Domingo, M.V. Cañamares, Z. Jurasekova, E. del Puerto, S. Sánchez-Cortés, J.V. García-Ramos.
Aplicaciones de la espectroscopía SERS (Surface-Enhanced Raman Scattering) a la detección de pigmentos orgánicos naturales en objetos del Patrimonio Cultural.
In "Plasmónica: detección sobre nanoestructuras metálicas", P. Sevilla (Ed.), Sociedad Española de Óptica.
Madrid 2010. pp. 197-230.
ISBN: 978-84-693-2183-6.
10. L. Guerrini, P. Leyton, M. Campos-Vallette, C. Domingo, J.V. Garcia-Ramos, S. Sanchez-Cortes.
Detection of Persistent Organic Pollutants using SERS sensors based on organically functionalized Ag nanoparticles .
In "Surface Enhanced Raman Spectroscopy- Analytical and Life Science Applications", S. Schlücker Ed,
Wiley (2010). pp. 103-127.
ISBN: 9783527325672.

6.3.4 **DPTO. DE ESPECTROSCOPIA VIBRACIONAL Y PROCESOS MULTIFOTÓNICOS / VIBRATIONAL SPECTROSCOPY AND MULTIPHOTON PROCESSES**

11. P. Carmona, I. Sánchez-Alonso and M. Careche.
Chemical changes during freezing and frozen storage of fish investigated by vibrational spectroscopy.

Applications of Vibrational Spectroscopy in Food Science. Volume I, Instrumentation and Fundamental Applications. E.C.Y. Li-Chan, P.R. Griffiths and J.M. Chalmers (Eds.), John Wiley, Chichester, 2010, p. 229-240.
ISBN: 978-0-470-74299-0

12. V. Giannini, O.L. Muskens, J. Gómez Rivas, and J.A. Sánchez-Gil.
Emisión espontánea cerca de nanoestructuras: Teoría, Cap. 1, pp. 1-14, en “Plasmónica: detección sobre nanoestructuras metálicas”, P. Sevilla (Ed.), Sociedad Española de Óptica, Madrid 2010.
ISBN: 978-84-693-2183-6.
13. V. Giannini, O.L. Muskens, J. Gómez Rivas, and J.A. Sánchez-Gil.
Emisión espontánea cerca de nanoestructuras: Resultados experimentales de fluorescencia modificada por nanoantennas, Cap. 2, pp. 15-24, en “Plasmónica: detección sobre nanoestructuras metálicas”, P. Sevilla (Ed.), Sociedad Española de Óptica, Madrid 2010.
ISBN: 978-84-693-2183-6.
14. V. Giannini, O.L. Muskens, J. Gómez Rivas, and J.A. Sánchez-Gil.
Spontaneous emission coupled to metal nanoantennas: Numerical calculations, Cap. 3, pp. 25-40.
en “Plasmónica: detección sobre nanoestructuras metálicas”, P. Sevilla (Ed.), Sociedad Española de Óptica, Madrid 2010.
ISBN: 978-84-693-2183-6.
15. A.M. Herrero, P. Carmona, F. Jiménez-Colmenero and C. Ruiz-Capillas.
Applications of vibrational spectroscopy to study structural changes in muscle and meat batter systems.
Applications of Vibrational Spectroscopy in Food Science. Volume I, Instrumentation and Fundamental Applications. E.C.Y. Li-Chan, P.R. Griffiths and J.M. Chalmers (Eds.), John Wiley, Chichester, 2010, p. 315-328.
ISBN: 978-0-470-74299-0
16. S. Martínez-Ramírez.
SERS Future Application: Cement Admixtures Identification. en “Plasmónica: Detección Sobre nanoestructuras metálicas” P. Sevilla (Ed.), Sociedad Española de Óptica, Madrid 2010. Cap. 15, pp. 293-300.
ISBN: 978-84-693-2183-6
17. S. Sanchez-Cortes y L. Guerrini.
Espectroscopía Raman intensificada por superficies nanoestructuradas de naturaleza plasmónica (SERS) en “Plasmónica: detección sobre nanoestructuras metálicas”, P. Sevilla (Ed.), Sociedad Española de Óptica, Madrid 2010. Cap. 7, pp. 99-124.
ISBN: 978-84-693-2183-6.
18. P. Sevilla (Ed.), *Plasmónica: detección sobre nanoestructuras metálicas*, Sociedad Española de Óptica, Madrid 2010. pp. 61-87.
ISBN: 978-84-693-2183-6.
19. P. Sevilla.
Fluorescencia de Biomoléculas sobre Nanopartículas Metálicas en “Plasmónica: detección sobre nanoestructuras metálicas”, P. Sevilla (Ed.), Sociedad Española de Óptica, Madrid 2010. Cap. 5, pp. 61-87.
ISBN: 978-84-693-2183-6.

BOOKS, PROCEEDINGS AND OTHER PUBLICATIONS IN COMMON WITH FM DEPARTMENT

C. Domingo, M.V. Cañamares, Z. Jurasekova, E. del Puerto, S. Sanchez-Cortes, J.V. García-Ramos
Aplicaciones de la espectroscopía SERS (Surface-Enhanced Raman Scattering) a la detección de pigmentos orgánicos naturales en objetos del Patrimonio Cultural en “Plasmónica: detección sobre nanoestructuras metálicas”, P. Sevilla (Ed.), Sociedad Española de Óptica, Madrid 2010. Cap. 11, pp. 197-230.
ISBN: 978-84-693-2183-6.

L. Guerrini, P. Leyton, M. Campos-Vallette, C. Domingo, J.V. Garcia-Ramos, S. Sanchez-Cortes
Detection of Persistent Organic Pollutants using SERS sensors based on organically functionalized Ag nanoparticles en “Surface Enhanced Raman Spectroscopy- Analytical and Life Science Applications”, S.Schlücker Ed, Wiley (2010). pp. 103-127.

6.4 TESIS DOCTORALES / Ph. D. THESES

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

Title: **Electroweak processes in nuclei.**

University: Facultad de Ciencias Físicas, Universidad Complutense de Madrid.

Date: 13th May 2010.

Mark: Sobresaliente “cum laude”.

Candidate: **Óscar Moreno Díaz**

Supervisor: **Pedro Sarriguren Suquilbide and Elvira Moya Valgañón.**

Title: **Cosmología cuántica de lazos: anisotropías e inhomogeneidades.**

University: Facultad de Ciencias Físicas, Universidad Complutense de Madrid.

Date: 14th July 2010.

Mark: Sobresaliente “cum laude”.

Candidate: **Mercedes Martín Benito.**

Supervisor: **Guillermo A. Mena Marugán and Luis J. Garay Elizondo.**

6.4.2 DPTO. DE FÍSICA NUCLEAR Y FÍSICA ESTADÍSTICA / NUCLEAR PHYSICS AND STATISTICAL PHYSICS

Title: **Emisión de partículas tras la desintegración β en núcleos deficientes en neutrones: ^{17}Ne , ^{32}Ar y ^{33}Ar .**

University: Facultad de Ciencias Físicas, Universidad Complutense de Madrid.

Date: 3 December 2010.

Mark: Sobresaliente.

Candidate: **Ricardo Domínguez Reyes.**

Supervisores: **M^a José García Borge and Luis M. Fraile Prieto.**

Title: **Nuclear structure of ^{12}C from 3-body break-up studies by light ion reactions in complete Kinematics.**

University: Facultad de Ciencias Físicas, Universidad Complutense de Madrid.

Date: 22nd of April 2010.

Mark: Sobresaliente “cum laude”.

Candidate: **Martín Alcorta.**

Supervisor: **Olof Tengblad.**

Title: **Estudio de la estructura a espín moderado en $^{187-189}\text{Os}$ y $^{187,188}\text{Ir}$.**

University: Facultad de Ciencias Físicas, Universidad Complutense de Madrid.

Date: 23rd of April 2010.

Mark: Sobresaliente.

Candidate: **Victor Modamio Hoybjor.**

Supervisor: **Andrea Jungclaus.**

6.4.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS

Title: **Sistemas de interés atmosférico: estudio teórico y predicción de espectros de absorción infrarroja.**

University: Facultad de Ciencias, Universidad Autónoma de Madrid.

Date: 19 February 2010.

Mark: Sobresaliente “cum laude”. (Thesis in European format).

Candidate: **Beatriz Martín Llorente.**

Supervisor: **Rafael Escribano Torres.**

6.4.4 DPTO. DE ESPECTROSCOPIA VIBRACIONAL Y PROCESOS MULTIFOTÓNICOS / VIBRATIONAL SPECTROSCOPY AND MULTIPHOTON PROCESSES

Title: Estudio del comportamiento de dos tratamientos antigraffiti como protectores de materiales de construcción: Interacción antigraffiti/substrato, propiedades y durabilidad.

University: Facultad de Geológicas, Universidad Complutense de Madrid.

Date: 26 February 2010.

Mark: Sobresaliente “cum laude”.

Candidate: Paula M. Carmona Quiroga.

Supervisor: M.T. Blanco Varela and Sagrario Martínez Ramírez.

6.4.5. DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

Title: Control de la Nanoestructura como procedimiento para optimizar las propiedades físicas de materiales compuestos de matriz polimérica y nanotubos de carbono.

University: Universidad Autónoma de Madrid

Date: 9th of April 2010.

Mark: Sobresaliente “cum laude”.

Candidate: Jaime Javier Hernández Rueda.

Supervisor: Mari Cruz García-Gutiérrez and Tiberio A. Ezquerro Sanz.

6.5 TESIS DE LICENCIATURA, DIPLOMAS DE ESTUDIOS AVANZADOS Y TRABAJOS DE MÁSTER

6.5.1 DPTO. DE QUÍMICA Y FÍSICA TEÓRICA / THEORETICAL PHYSICS AND CHEMISTRY

Title: Cosmología cuántica de lazos inhomogénea: el modelo de Gowdy con un campo material escalar.

University: Facultad de Ciencias Físicas, Universidad Complutense de Madrid.

Date: 14th September 2010.

Mark: Sobresaliente.

Candidate: Daniel Martín de Blas.

Supervisor: Guillermo A. Mena Marugán.

6.5.2 DPTO. DE FÍSICA NUCLEAR Y FÍSICA ESTADÍSTICA / NUCLEAR PHYSICS AND STATISTICAL PHYSICS

Title: Estudio de la desintegración β del núcleo $N = Z$ ^{72}Kr .

University: Facultad de Ciencias Físicas, Universidad Complutense de Madrid.

Date: 25th of June 2010.

Mark: Sobresaliente.

Candidate: José Antonio Briz Monago.

Supervisor: M^a José García Borge.

Title: Estudio de la Reacción de Captura Directa $^4\text{He}(^3\text{He},\gamma)^7\text{Be}$ con Interés Astrofísico.

University: Facultad de Ciencias Físicas, Universidad Complutense de Madrid.

Date: 25th of June 2010.

Mark: Sobresaliente.

Candidate: Mariano Carmona Gallardo.

Supervisor: Olof Tengblad and B. S. Nara Singh.

6.5.4 DPTO. DE ESPECTROSCOPIA VIBRACIONAL Y PROCESOS MULTIFOTÓNICOS / VIBRATIONAL SPECTROSCOPY AND MULTIPHOTON PROCESSES

Title: Espectroscopía Ópticas (Fluorescencia y Raman) sobre nanopartículas metálicas de los fármacos emodina y piroxicam y sus complejos con albúmina de suero bovina

University: Facultad de Ciencias, Universidad Complutense de Madrid.

Date: July 2010.

Mark: Sobresaliente

Candidate: Raquel de Llanos

Supervisor: Paz Sevilla Sierra y Santiago Sánchez Cortés.

Title: Valorización de lodos atomizados de estaciones de tratamiento de agua potable como materia prima en la elaboración de crudos de cemento.

University: Facultad de Ciencias, Universidad Autónoma de Madrid.

Date: September 2010.

Mark: Sobresaliente.

Candidate: Nuria Husillos Rodríguez.

Supervisor: Sagrario Martínez Ramírez and M. Teresa Blanco Varela.

6.5.5. DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

Title: Simulación del proceso de cristalización de diferentes copolímeros de etileno en disolución diluidas.

University: Universidad Politécnica de Madrid.

Date: 22th of September 2010.

Mark: Sobresaliente.

Candidate: Sara Sanmartín Sánchez.

Supervisor: Javier Martínez de Salazar Bascuñana y Javier Ramos Díaz.

Title: Caracterización de materiales compuestos de polipropileno y fibras de celulosa por medio de técnicas de indentación. (Proyecto Fin de Carrera)

University: Escuela universitaria de Ingeniería Técnica Industrial, Universidad Politécnica de Madrid.

Date: 15 October 2010.

Mark: Sobresaliente.

Candidate: Fátima Montero Sánchez.

Supervisor: Fernando Ania García.

CAPÍTULO 7
TABLAS Y DATOS

CHAPTER 7
TABLES AND DATA

7.1 DATOS COMPARATIVOS CON LAS PREVISIONES DEL PLAN ESTRATÉGICO / DATA COMPARED TO EXPECTATIONS FROM THE STRATEGIC PLAN

	Expected 2006	2006	Expected 2007	2007	Expected 2008	2008	Expected 2009	2009	Expected 2010	2010
Number of ISI publications	140	178	147	181	155	171	165	166	152	174
Number of non-ISI publications	13	20	13	31	14	46	14	29	-	28
Total stock of PhD fellowships and contracts	24	39	25	40	25	41	26	34	-	25
Stock of postdoc fellowships and contracts	14	18	15	15	16	22	18	18	-	22
Number of PhD Theses defended	5	8	5	10	6	5	7	11	7	8
“Créditos” in PhD and Master Courses	22	27,5	25	49,2	28	46	30	43,6	33,8	41,4

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

JOURNAL	NUMBER OF PAPERS	IMPACT FACTOR (JCR -2008)
Living Reviews in Relativity	1	10.600
Nano Letters	1	9.991
Astrophysical Journal	2	7.364
Physical Review Letters	7	7.328
Journal of Cosmology and Astroparticle Physics	1	6.502
Journal of Biological Chemistry	3	5.328
Physics Letters B	4	5.083
Physical Review D	13	4.922
Soft Matter	2	4.869
Journal of Chemical Theory and Computation	1	4.804
Macromolecules	3	4.539
<i>Biomacromolecules</i>	1	4.502
Nuclear Physics B	1	4.341
Astroparticle Physics	1	4.136
Physical Chemistry Chemical Physics	5	4.116
Journal of Polymer Science Part A: Polymer Chemistry	2	3.971
Langmuir	4	3.898
Journal of Molecular Biology	1	3.871
Plasmonics	2	3.723
Polymer	2	3.573
Physical Review C	20	3.477
Physical Review B	5	3.475
CHEMPHYSICHEM	1	3.453
New Journal of Physics	2	3.312
Optics Express	2	3.278
Biochemistry	1	3.226
Journal of Raman Spectroscopy	4	3.147

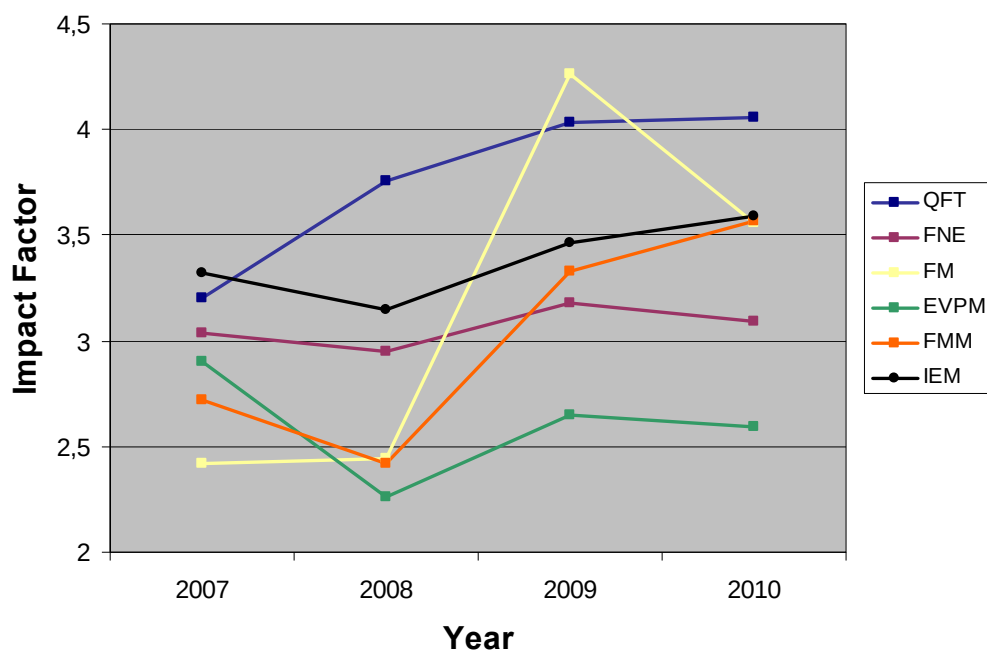
Journal of Chemical Physics	4	3.093
Classical and Quantum Gravity	1	3.029
Composites Science and Technology	1	2.901
Journal of Physical Chemistry A	1	2.899
EPL-Europhys Lett	3	2.893
Physical Review A	3	2.866
Annals of Physics	1	2.677
Physical Review E	1	2.400
Chemical Physics Letters	1	2.291
Chemical Physics	1	2.277
Journal of Physics G: Nuclear and Particle Physics	3	2.124
Journal of Physics D-Applied Physics	1	2.083
Journal of Applied Physics	1	2.072
Colloid and Polymer Science	1	2.057
European Physical Journal A	3	1.968
Journal of Physics: Condensed Matter	1	1.964
Thin Solid Films	1	1.727
Nuclear Physics A	6	1.706
Molecular Physics	2	1.634
Applied Physics A	2	1.595
Journal of Thermal Analysis and Calorimetry	1	1.587
Spectrochimica Acta A	1	1.566
Applied Spectroscopy	1	1.564
Journal of Molecular Structure	2	1.551
Journal of Cultural Heritage	1	1.505
Journal of Molecular Liquids	1	1.278
Journal of Molecular Structure (TEOCHEM)	1	1.216
Journal of Applied Polymer Science	5	1.203
Journal of Nanomaterials	1	1.023
Infrared Physics & Technology	1	0.903
International Journal of Modern Physics E-Nuclear Physics	1	0.643
Metamaterials	1	-
Macromolecular Symposia	1	-
Journal of Physics Conference Series	6	-
AIP Conference Proceedings	13	-
NATO Science for Peace and Security Series A-Chemistry and Biology	4	-
PRAMANA-JOURNAL OF PHYSICS	1	-
Plasmonics in Biology and Medicine VII. Proc. Of SPIE	1	-
IOP Conf. Ser.: Mater. Sci. Eng.	1	-
TOTAL:	174	Average Impact Factor: 3,59

Number of Journals: 60

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
 Nuclear Physics and Statistical Physics: FNFE
 Molecular Physics: FM
 Vibrational Spectroscopy and
 Multiphoton Processes: EVPM
 Macromolecular Physics: FMM



7.4 PERSONAL POR DEPARTAMENTOS / PERSONNEL BY DEPARTMENTS

DPTO.	Scientific Staff		“Ramón y Cajal”		Other PostDocs		Adjoint Researchers		Rest of the Scientific Personnel ¹		Support Staff		Total		
	M	F	M	F	M	F	M	F	M	F	M	F	M	F	TOTAL
QFT	7	1	-	-	7	2	3	2	4	3	-	-	21	8	29
FNFE	4	2	-	-	1	1	-	-	5	-	7	1	17	4	21
FM	10	3	-	1	2	2	-	-	-	1	3	2	15	9	24
EVPM	5	2	-	-	1	3	-	3	2	3	1	1	9	12	21
FMM	6	6	-	-	2	-	1	1	4	2	2	1	15	10	25
Admon.	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	10	-	10	10
IEM	32	14	-	1	13	8	4	6	15	9	13	15	77	53	130

¹ “Authorized Stay” excluded

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

**Personal del IEM sin incluir Drs. Vinculados /
 Personnel of the IEM excluding the Adjoint Researchers: 120**

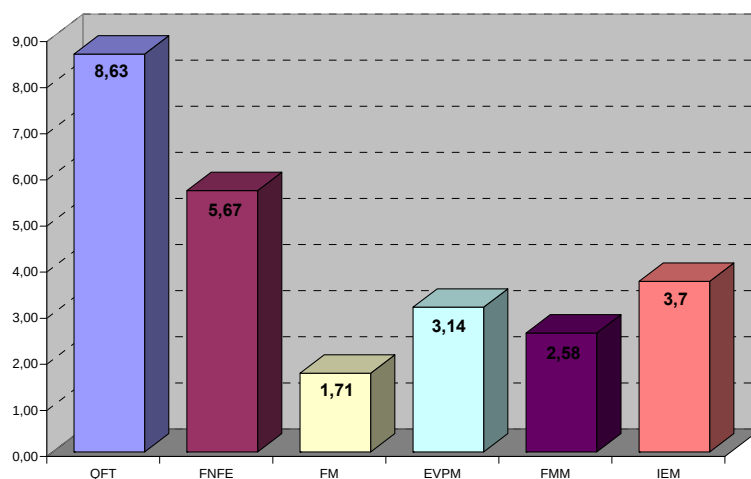
7.5 NÚMERO DE PUBLICACIONES POR DEPARTAMENTOS / NUMBER OF PAPERS BY DEPARTMENTS

	QFT	FNFE	FM	EVPM	FMM
ISI publications	69	34	24(+6)*	22(+6)*	31
Other publications	2	6	9(+2)*	11(+2)*	2

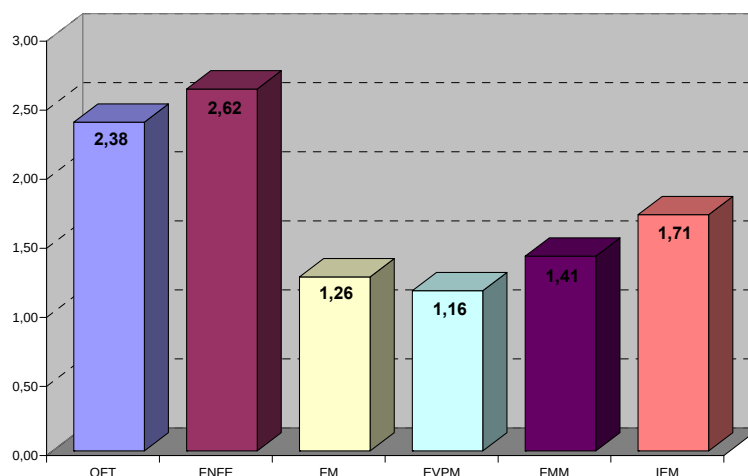
* In parenthesis, papers shared between the FM and EVPM Departments.

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

- **Ratio por investigador senior** (plantilla más “Ramón y Cajal”) /
Ratio per senior researcher (staff plus “Ramón y Cajal”).



- **Ratio por personal científico** (sin incluir personal de apoyo) /
Ratio per scientific personnel (excluding support staff).



(See “Department Key” in section 7.3)

Ratio de publicaciones ISI del IEM por personal científico en plantilla /
Ratio of ISI publications of IEM per scientific staff researcher: 3.78.

ÍNDICE

INDEX

Introducción / Introduction	1
1. Estructura del Instituto / Structure of the Institute	3
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	6
Dpto. de Física Nuclear y Física Estadística	7
Dpto. de Física Molecular	8
Dpto. de Espectroscopía Vibracional y Procesos Multifotónicos	8
Dpto. de Física Macromolecular	9
Unidad de Gestión Económica-Administrativa / Financial and Administrative Office	10
Servicios del Centro de Física Miguel Antonio Catalán / Service Units of the Center of Physics CFMAC	10
2A. Labor Investigadora	13
2A.1 Dpto. de Química y Física Teóricas.....	15
2A.2 Dpto. de Física Nuclear y Física Estadística.....	21
2A.3 Dpto. de Física Molecular.....	26
2A.4 Dpto. de Espectroscopía Vibracional y Procesos Multifotónicos.....	32
2A.5 Dpto. de Física Macromolecular.....	37
2B. Research Activities.....	45
2B.1 Theoretical Physics and Chemistry Dept.	47
2B.2 Nuclear Physics and Statistical Physics Dept.	53
2B.3 Molecular Physics Dept.	58
2B.4 Vibrational Spectroscopy and Multiphoton Processes Dept.....	63
2B.5 Macromolecular Physics Dept.	67
3. Proyectos de Investigación / Research Grants	75
3.1 Dpto. de Química y Física Teóricas.....	77
3.2 Dpto. de Física Nuclear y Física Estadística.....	78
3.3 Dpto. de Física Molecular.....	80
3.4 Dpto. de Espectroscopía Vibracional y Procesos Multifotónicos.....	81
3.5 Dpto. de Física Macromolecular.....	83
4. Cooperación Científica / Scientific Cooperation.....	87
4.1 Congresos y Reuniones Nacionales / National Congresses and Meetings.....	89
4.1.1 Dpto. de Química y Física Teóricas.....	89
4.1.2 Dpto. de Física Nuclear y Física Estadística	89
4.1.3 Dpto. de Física Molecular	89
4.1.4 Dpto. de Espectroscopía Vibracional y Procesos Multifotónicos	89
4.1.5 Dpto. de Física Macromolecular	90
4.2 Congresos y Reuniones Internacionales / International Congresses and Meetings.....	91
4.2.1 Dpto. de Química y Física Teóricas	91
4.2.2 Dpto. de Física Nuclear y Física Estadística	93
4.2.3 Dpto. de Física Molecular	94
4.2.4 Dpto. de Espectroscopía Vibracional y Procesos Multifotónicos	97
4.2.5 Dpto. de Física Macromolecular	99
4.3 Estancias de Investigadores en el Instituto / Visitors	100
4.3.1 Dpto. de Química y Física Teóricas	100
4.3.2 Dpto. de Física Nuclear y Física Estadística	101

4.3.3	Dpto. de Física Molecular	101
4.3.4	Dpto. de Espectroscopía Vibracional y Procesos Multifotónicos	101
4.3.5	Dpto. de Física Macromolecular	101
4.4	Conferencias de Investigadores Invitados / Invited Conferences.....	102
4.4.1	Dpto. de Química y Física Teóricas	102
4.4.2	Dpto. de Física Nuclear y Física Estadística	104
4.4.3	Dpto. de Física Molecular	105
4.4.5	Dpto. de Física Macromolecular	105
4.5	Visitas de Investigadores a Centros Internacionales / Visits to Foreign Institutions .	105
4.5.1	Dpto. de Química y Física Teóricas	105
4.5.2	Dpto. de Física Nuclear y Física Estadística	106
4.5.3	Dpto. de Física Molecular	107
4.5.4	Dpto. de Espectroscopía Vibracional y Procesos Multifotónicos	107
4.5.5	Dpto. de Física Macromolecular	108
5.	Labor Docente, Difusión de la Ciencia y Otras Actividades / Teaching, Outreach, and Other Activities	109
5.1	Docencia / Teaching	111
5.1.1	Dpto. de Química y Física Teóricas	111
5.1.2	Dpto. de Física Nuclear y Física Estadística	112
5.1.3	Dpto. de Física Molecular	112
5.1.4	Dpto. de Espectroscopía Vibracional y Procesos Multifotónicos	112
5.1.5	Dpto. de Física Macromolecular	113
5.2	Cursos y Conferencias / Courses and Conferences	113
5.2.1	Dpto. de Química y Física Teóricas	113
5.2.3	Dpto. de Física Molecular	113
5.2.4	Dpto. de Espectroscopía Vibracional y Procesos Multifotónicos	114
5.2.5	Dpto. de Física Macromolecular	114
5.3	Cursos, Congresos y Seminarios Organizados por el Instituto / Courses, Congresses, and Seminars Organized by the Institute.....	115
5.3.1	Dpto. de Química y Física Teóricas	115
5.3.3	Dpto. de Física Molecular	116
5.3.4	Dpto. de Espectroscopía Vibracional y Procesos Multifotónicos	116
5.3.5	Dpto. de Física Macromolecular	117
5.4	Premios y Otros Méritos /Awards	118
5.4.1	Dpto. de Química y Física Teóricas	118
5.4.2	Dpto. de Física Nuclear y Física Estadística	118
5.4.3	Dpto. de Física Molecular	119
5.4.4	Dpto. de Espectroscopía Vibracional y Procesos Multifotónicos	119
5.4.5	Dpto. de Física Macromolecular	120
5.5	Actividades y Material de Divulgación / Outreach Activities and Material	120
5.5.1	Dpto. de Química y Física Teóricas	120
5.5.2	Dpto. de Física Nuclear y Física Estadística	122
5.5.3	Dpto. de Física Molecular	122
5.5.4	Dpto. de Espectroscopía Vibracional y Procesos Multifotónicos	122
5.5.5	Dpto. de Física Macromolecular	122
5.6	Transferencia de Tecnología / Transfer of Technology	123
5.6.3	Dpto. de Física Molecular	123
5.6.5	Dpto. de Física Macromolecular	123
5.7	Unidades Asociadas y Otras Actividades / Associated Units and Other Activities	124
5.7.1.	Dpto. de Química y Física Teóricas	124
5.7.3	Dpto. de Física Molecular	124
5.7.4	Dpto. de Espectroscopía Vibracional y Procesos Multifotónicos	124
5.7.5	Dpto. de Física Macromolecular	125

6	Publicaciones y Producción Científica / Publications and Scientific Production	127
6.1	Publicaciones en Revistas y Proceedings ISI / ISI Publications	129
6.1.1	Dpto. de Química y Física Teóricas	129
6.1.2	Dpto. de Física Nuclear y Física Estadística	133
6.1.3	Dpto. de Física Molecular	137
6.1.4	Dpto. de Espectroscopía Vibracional y Procesos Multifotónicos	139
6.1.5	Dpto. de Física Macromolecular	141
6.2	Publicaciones en Revistas No JCR-ISI / Non JCR-ISI Publications.....	143
6.2.2	Dpto. de Física Nuclear y Física Estadística	143
6.2.3	Dpto. de Física Molecular	144
6.2.5	Dpto. de Física Macromolecular	144
6.3	Libros, Monografías y Publicaciones de <i>Proceedings</i> / Books, Proceedings, and Other Publications	144
6.3.1	Dpto. de Química y Física Teóricas	144
6.3.3	Dpto. de Física Molecular	145
6.3.4	Dpto. de Espectroscopía Vibracional y Procesos Multifotónicos	145
6.4	Tesis Doctorales / PhD Theses	147
6.4.1	Dpto. de Química y Física Teóricas	147
6.4.2	Dpto. de Física Nuclear y Física Estadística	147
6.4.3	Dpto. de Física Molecular	147
6.4.4	Dpto. de Espectroscopía Vibracional y Procesos Multifotónicos	147
6.4.5	Dpto. de Física Macromolecular	148
6.5	Tesinas, Diploma de Estudios Avanzados y Trabajos de Máster / Graduate Diplomas and Master Theses	148
6.5.1	Dpto. de Química y Física Teóricas	148
6.5.2	Física Nuclear y Física Estadística.....	148
6.5.4	Dpto. de Espectroscopia Vibracional y Procesos Multifotónicos	148
6.5.5	Dpto. de Física Macromolecular	149
7	Tablas y Datos / Tables and Data.....	151
7.1	Datos comparativos con las previsiones del Plan Estratégico / Data compared to expectations from the Strategic Plan.....	153
7.2	Resumen de publicaciones en revistas JCR-ISI / Summary of publications in JCR-ISI journals ...	153
7.3	Evolución del índice de impacto (revistas JCR-ISI) por Departamentos / Evolution of the impact factor (JCR-ISI-Journals) by Departments	155
7.4	Personal por Departamentos / Personnel by Departments.....	155
7.5	Número de publicaciones por Departamentos / Number of publications by Departments	156
7.6	Ratio de publicaciones JCR-ISI por Departamentos / Ratio of JCR-ISI publications by Departments.....	156