

INSTITUTO DE ESTRUCTURA DE LA MATERIA

MEMORIA DE LA LABOR REALIZADA AÑO 2012

**CONSEJO SUPERIOR DE INVESTIGACIONES
CIENTÍFICAS**

ANNUAL REPORT 2012



**GOBIERNO
DE ESPAÑA**

**MINISTERIO
DE ECONOMÍA
Y COMPETITIVIDAD**



CSIC
CONSEJO SUPERIOR DE INVESTIGACIONES CIENTÍFICAS

INTRODUCCIÓN

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

El IEM fue fundado en 1976, con la unión de algunos investigadores en Física de Partículas, Física Molecular, Química Cuántica y Polímeros Cristalinos. Con la llegada de nuevos científicos y con los cambios experimentados por algunas líneas de investigación, las actividades científicas del IEM han ido incluyendo otras áreas como la Física Nuclear, la Espectroscopía en Nanoestructuras Metálicas o la Gravitación. Durante 2012, las actividades de investigación han estado organizadas alrededor de cuatro Departamentos con grupos experimentales y teóricos cuyos campos científicos abarcan la Física Nuclear, Estadística, Molecular y Macromolecular, la Biofísica, la Física de la Materia Condensada y la Física Gravitacional. Parte de esta investigación utiliza grandes instalaciones nacionales e internacionales. La actividad investigadora se concentra en el área de la Física, aunque con aplicaciones en Química Física y en otras áreas relacionadas.

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

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

Desde 1994, el IEM pertenece al Centro de Física Miguel Antonio Catalán (CFMAC). Los Servicios de Biblioteca, Informática, Mantenimiento, Almacén, Proyectos, Taller Mecánico, Taller Óptico, y 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 2012 en 182 publicaciones ISI.

INTRODUCTION

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

The IEM was founded in 1976 with the union of some researchers in Particle Physics, Molecular Physics, Quantum Chemistry and Crystalline Polymers. With the advent of new scientists and the changes experienced by some research topics, the scientific activities of IEM have included other areas such as Nuclear Physics, Spectroscopy of Metal Nanostructures and Gravitation. During 2012, research activities have been organized around four Departments with experimental and theoretical groups whose scientific fields include Nuclear Physics, Statistics, Molecular, and Macromolecular Physics, Biophysics, Physics of Condensed Matter, and Gravitational Physics. Part of this research has involved the use of large national and international facilities. The research activity is concentrated in the area of Physics, but with applications in Physical Chemistry and other related fields.

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

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

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

The mission of the IEM, as described in its Action Plan for the period 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 2012, has crystallized in 182 ISI publications.

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

Dr. José González Carmona

Dr. Rafael Molina Fernández

Dra. M^o del Sagrario Martínez Ramírez

D. Miguel Ángel Moreno Alba

Dra. Aurora Nogales Ruiz

Dr. Santiago Sánchez Cortés

CLAUSTRO CIENTÍFICO / SCIENTIFIC STAFF

Presidente: Dr. Guillermo Antonio Mena Marugán

Secretario: Dr. Rafael Molina Fernández

Personal Investigador en plantilla:

Dr. Fernando Ania García

Dr. Jesús Fernando Barbero González

Prof. Francisco Javier Bermejo Barrera

Prof. Dionisio Bermejo Plaza

Dr. Carlos Cabrillo García

Dra. M^a Esperanza Cagiao Escohotado

Dr. Gianluca Calcagni

Dra. M^a José Capitán Aranda

Dr. Pedro Carmona Hernández

Dr. Víctor 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

Dr. Óscar Gálvez González

Prof. M^a José García Borge

Dra. M^a Cruz García Gutiérrez

Prof. José Vicente García Ramos

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 Bascuñana

Dra. M^a del Sagrario Martínez Ramírez
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
Dr. Francisco Javier Ramos Díaz
Dr. Daniel Reyes Rueda Bravo
Dr. Santiago Sánchez Cortés
Dr. José Antonio Sánchez Gil
Dr. Julio Francisco Santos Gómez
Prof. Pedro Sarriguren Suquilbide
Dra. M^a Luisa Senent Díez
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:

Dr. Jorge Dukelsky Bercovich

Profesor de Investigación / Research Professor

Dr. Pedro Sarriguren Suquilbide

Profesor de Investigación / Research Professor

Dr. Jesús Fernando Barbero González

Investigador Científico / Research Scientist

Dr. Eduardo Garrido Bellido

Investigador Científico / Research Scientist

Dr. Guillermo Antonio Mena Marugán

Investigador Científico / Research Scientist

Dra. María Luisa Senent Díez

Investigadora Científica / Research Scientist

Dr. Rafael Alejandro Molina Fernández

Científico Titular / Tenured scientist

Dr. Gianluca Calcagni

Investigador Contratado RyC / Postdoc Contract RyC (since 1 September 2012)

Dra. Mariam Bouhmadi López

Postdoctoral JAE / Postdoc Contract JAE (since March 2012)

Dr. Jordi Mur Petit

Postdoctoral JAE / Postdoc Contract JAE

Dr. Pablo San José Martín

Postdoctoral JAE / Postdoc Contract JAE (until November 2012)

Dr. Javier Rodríguez Laguna

Postdoctoral asociado a proyecto / Postdoc from research grant

Dra. Rosa Domínguez Gómez

Doctora Vinculada / Adjoint Researcher

Dr. Luis Javier Garay Elizondo

Doctor Vinculado / Adjoint Researcher

Dra. Elvira Moya Valgañón (de Guerra)

Doctora Vinculada / Adjoint Researcher

D. Mikel Fernández Méndez

Becario Predoctoral JAE / PhD Fellowship JAE

D. Daniel Huerga Gómez

Becario Predoctoral JAE / PhD Fellowship JAE

D. Daniel Martín de Blas

Becario Predoctoral JAE / PhD Fellowship JAE

D. Javier Antonio Olmedo Nieto

Becario Predoctoral JAE / PhD Fellowship JAE (until July 2012)

Dña. Esther Vicente Torricco

Becaria Predoctoral-JAE / PhD Fellowship-JAE (until 30 of June 2012)

Dr. Óscar Moreno Díaz

Autorización de Permanencia / Authorized Stay

Dr. Nicu Sandulescu

Autorización de Permanencia / Authorized Stay (since October 2012)

Personal de apoyo / Support Staff:

Dña. Isabel Pacho Velázquez

Contratado Técnico-JAE / Technician-JAE (since September 2011)

**DPTO. DE ESPECTROSCOPIA NUCLEAR, VIBRACIONAL Y DE MATERIA DESORDENADA
/ NUCLEAR, VIBRATIONAL AND DISORDERED MEDIA SPECTROSCOPY****Jefe del Departamento / Head of Department:**

Dr. Santiago Sánchez Cortés

Investigador Científico / Research Scientist

Personal Científico / Research Staff:

Prof. Javier Bermejo Barrera

Profesor de Investigación / Research Professor

Profª. Mª José García Borge

Profesora de Investigación / Research Professor (special services in CERN from July 2012)

Prof. José V. García Ramos

Profesor de Investigación / Research Professor

Prof. Olof Erik Tengblad

Profesor de Investigación / Research Professor

Dr. Carlos Cabrillo García

Investigador Científico / Research Scientist

Dr. Pedro Carmona Hernández

Investigador Científico / Research Scientist

Dra. Andrea Jungclaus

Investigadora Científica / Research Scientist

Dr. José Antonio Sánchez Gil

Investigador Científico / Research Scientist

Dra. Mª Vega Cañamares Arribas

Científica Titular / Tenured Scientist (since June)

Dr. Luís Díaz Sol

Científico Titular / Tenured Scientist

Dr. Ricardo Fernández Perea

Científico Titular / Tenured Scientist

Dra. Sagrario Martínez Ramírez

Científica Titular / Tenured Scientist

Dr. Enrique Náchter González

Titulado Superior Especializado / Specialized University Graduate.

Dra. Ana Delia Becerril Reyes

Contrato Postdoctoral EXNUC/ Postdoc Contract EXNUC

Dr. Luis Froufe Pérez

Contrato Postdoctoral JAE/ Postdoc Contract JAE

Dra. Isabel Sánchez Alonso

Contrato Postdoctoral JDC/ Postdoc Contract JDC

Dra. Marina Molina Santos

Doctora Vinculada / Adjoint Researcher

Dra. Paz Sevilla Sierra

Doctora Vinculada / Adjoint Researcher

Dña. Elisa Corda

Titulado Superior Contratado/ University Graduate (from July 2012)

D. Mario Alberto Cubero Campos

Titulado Superior Contratado / University Graduate

Dr. Alexander Gottberg

Titulado Superior Contratado / University Graduate

D. Andrés Illana Sisón

Titulado Superior Contratado / University Graduate

D. Eduardo López Tobar

Titulado Superior Contratado / University Graduate (from August 2012)

D. Ruben Lorenzo Ortega

Titulado Superior Contratado / University Graduate

Dr. Riccardo Orlandi

Titulado Superior Contratado CPAN / CPAN University Graduate (until August 2012)

D. Vicente Pesudo Fortes

Titulado Superior Contratado / University Graduate

Dr. José Sánchez del Río Sáez

Titulado Superior Contratado / University Graduate

Dra. Francesca Zocca

Titulado Superior Contratado/ University Graduate (until January 2012)

D. Jorge Sánchez Rosado

Titulado Medio Contratado CPAN / CPAN Mechanic Engineer (until April 2012)

D. José Antonio Briz Monago

Becario Predoctoral-FPI / PhD Fellowship-FPI

D. Mariano Carmona Gallardo

Becario Predoctoral JAE / PhD Fellowship-JAE

Dña. Adianez García Leis

Becaria Predoctoral- JAE / PhD Fellowship-JAE

Dña. Irene Izquierdo Lorenzo

Becaria Predoctoral- JAE / PhD Fellowship-JAE (until May 2012)

D. Ramón Paniagua Domínguez

Becario Predoctoral-JAE / PhD Fellowship-JAE

D. Guillermo Ribeiro Jiménez

Becario Predoctoral-FPI / PhD Fellowship-FPI

D. Ángel Perea Martínez

Técnico Especializado G. Medio / Technician

Dña. Elena del Puerto Nevado

Autorizado Permanencia / Authorized Stay

Dr. Alessandro Feis

Autorizado Permanencia / Authorized Stay (until November 2012)

Dña. Jana Kubackova

Autorizado Permanencia / Authorized Stay

Dr. Fernando López-Tejeira Sagües

Autorizado Permanencia / Authorized Stay

D. Rogelio Rodríguez Oliveros
Dra. Lorena Roldán
D. Jan Taprogge

Autorizado Permanencia / Authorized Stay (until June 2012)
Autorizado Permanencia / Authorized Stay
Autorizado Permanencia / Authorized Stay

Personal de apoyo / Support Staff:

D. Ángel Perea Martínez

Técnico Especializado G. Medio / Technician

Dña. Purificación Corchete Corchete

Ayudante de Investigación OPI/ Research Assistant
OPI

Dña. Margarita Hernández González

Contrato Técnicos de Apoyo MICINN / Technical
Support Program Contract (MICINN)

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

Profesor de Investigación / Research Professor

Profa. Concepción Domingo Maroto

Profesora de Investigación / Research Professor

Prof. Rafael Escribano Torres

Profesor de Investigación / Research Professor

Prof. Víctor José Herrero Ruiz de Loizaga

Profesor de Investigación / Research Professor

Prof. Salvador Montero Martín

Profesor de Investigación / Research Professor

Dr. José María Fernández Sánchez

Investigador Científico / Research Scientist

Dra. Isabel Tanarro Onrubia

Investigadora Científica / Research Scientist

Dr. Raúl Zósimo Martínez Torres

Científico Titular / Tenured Scientist

Dra. Belén Maté Naya

Científica Titular / Tenured Scientist

Dr. Juan Ortigoso Martínez

Científico Titular / Tenured Scientist

Dr. Julio Francisco Santos Gómez

Científico Titular / Tenured Scientist

Dr. Guzmán Tejeda Gala

Científico Titular / Tenured Scientist

Dr. Óscar Gálvez González

Postdoctoral RyC/ Postdoc Contract RyC

Dra. Esther Carrasco Burgos

Postdoctoral JdC / Postdoc Contract JdC (until 30
September 2012)

Dr. Francisco Gámez Márquez

Postdoctoral Junta de Andalucía/ Postdoc Contract Junta
de Andalucía (since 1 November 2012)

Dra. Elena Moreno Atahonero

Postdoctoral CONSOLIDER/ Postdoc Contract-
CONSOLIDER (since 1 September 2012)

Dra. Yamilet Rodríguez Lazcano

Postdoctoral JAE/ Postdoc Contract JAE

Dr. Alexandre Francois Zanchet

Postdoctoral Proyecto PN/Postdoc Contract Project PN
(since 1 September 2012)

Dña. Teresa Cueto Senra

Titulado Superior contratado / MSc contractor (since 16
November 2012) + Técnica Superior Contratada JAE-Tec
/Technician Contract JAE-Tec (until 15 September 2012)

Dña. María Encina López Arias

Becaria Predoctoral-UA / PhD Fellowship-UA

D. Miguel Jiménez Redondo

Becario Predoctoral-FPI / PhD Fellowship-FPI

D. Juan Hernández Morilla

Autorizado Permanencia / Authorized Stay

Personal de apoyo / Support Staff:

Dña. María José Malagón Sisto

Ayudante de Investigación OPI / Research Assistant
OPI

D. Miguel Ángel Moreno Alba

Ayudante de Investigación OPI / Research Assistant
OPI

D. David Pérez Risco

Ayudante de Investigación OPI / Research Assistant OPI

DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

Jefe del Departamento / Head of Department:

Dra. Aurora Nogales Ruíz

Investigador Científico / Research Scientist

Personal Científico / Research Staff:

Prof. Tiberio A. Ezquerro Sanz

Profesor de Investigación / Research Professor

Prof. Javier Martínez de Salazar Bascuñana

Profesor de Investigación / Research Professor

Dr. Daniel R. Rueda Bravo

Investigador Científico / Research Scientist

Dr. Fernando Ania García

Científico Titular / Tenured Scientist

Dra. Maria Esperanza Cagiao Escohotado

Científico Titular / Tenured Scientist

Dra. María José Capitán Aranda

Científico Titular / Tenured Scientist

Dr. Victor Cruz Cañas

Científico Titular / Tenured Scientist

Dra. Araceli Flores Aguilar-Amat

Científico Titular / Tenured Scientist

Dra. M^a Cruz García Gutiérrez

Científico Titular / Tenured Scientist

Dra. Amelia Linares Dos Santos

Científico Titular / Tenured Scientist

Dr. Juan Francisco Vega Borrego

Científico Titular / Tenured Scientist

Prof. Francisco José Baltá Calleja

Profesor de Investigación “ad honorem” / Research Professor “ad honorem” (until 22 Oct 2012)

Dra. Carmen Arribas Arribas

Doctor Vinculado / Doctor in Vinculum

Dr. Francisco Javier Ramos Díaz

Investigador Contratado R&C / Postdoc Contract R&C.

Dr. Alejandro Sanz Parras

Investigador Contratado JAE Postdoctoral / Postdoc JAE

Dra. Michela Soccio

Investigadora Contratada JAE DOC / Postdoc JAE

D. Ernesto Vicente Alique

Titulado Superior Contratado (until 31 July 2012)

Autorizado permanencia/Authorized Stay (from 1 September 2012)

D. Juan Felipe Franco González

Becario Predoctoral-FPI / PhD Fellowship-FPI

D. Ignacio Martín-Fabiani Carrato

Becario Predoctoral / PhD Fellowship

D. Daniel Martínez Tong

Becario Predoctoral JAE / PhD Fellowship-JAE

Dña. Nuria Robledo Álvaro

Becario Predoctoral -I3P / PhD Fellowship-I3P

D. Andreas Beensen

Autorizado Permanencia / Authorized Stay (until 31 May 2012)

Dña. Sara Sanmartín Sánchez

Becario Predoctoral-FPI / PhD Fellowship-FPI (until 30 September 2012)

Autorizado Permanencia/Authorized Stay (from 1 October 2012)

Dña. Marianella Hernández Santana

Autorizada Permanencia / Authorized Stay

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 Cuéllar

Ayudante de Investigación / Research Assistant (until 31 Oct 2012)

UNIDAD DE GESTIÓN ECONÓMICA-ADMINISTRATIVA / FINANCIAL AND ADMINISTRATIVE OFFICE

Dña. Pilar Criado Escribano

Gerente

Dña. M^a Teresa Burriel Barceló

Técnico Especialista de Grado Medio OPI [CFMAC]

Dña. Purificación Díez Rodríguez

Administrativo Cuerpo General Administración Estado

Dña. Ana María García Arribas

Ayudante de Investigación /Research Assistant

Dña. M^a Carmen García Collado

Cuerpo General Auxiliar Administración del Estado

Dña. Isabel Lombán Botello

Auxiliar Organismos Autónomos Administrativo

Dña. Concepción Nieto Serrano

Cuerpo Técnico Auxiliar de Informática

Dña. Susana Esteban Serrano

C. Auxiliares Postales y de Telegrafos

Dña. Eva Sánchez García	Técnico Superior de Gestión y Servicios Comunes JAE (until 15 September 2012)
Dña. Silvia Barrios Dominguez	Técnico Superior de Gestión y Servicios Comunes JAE (also support staff of the Dpt. of Macromolecular Physics)
Dña. Alicia Fernández Clavero	Ayudante de Investigación /Research Assistant (since 30 November 2012)

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

ALMACÉN / WAREHOUSE

Dña. Clara Isabel Cardeñosa García	Administrativo cuerpo General Administración Estado
D. Jose Manuel Segura Gonzalez	C. Auxiliar de Telecomunicaciones

BIBLIOTECA / LIBRARY

Dña. Flora Granizo Barrena	Técnico de Biblioteca y Documentación
Dña. Isabel Delgado Oliva	Titulado Técnico OPI
Dña. Margarita Martínez Álvarez	E. Administrativo de Organismos Autónomos (until 24 January 2012)
D. Samuel López Márquez	Administrativo

CONSERJERÍA / RECEPTION

D. Eduardo Balbas Utrilla	Ayudante Gestión y Servicios Comunes
Dña. Soledad Moreno Zambrano	Ayudante Gestión y Servicios Comunes

INFORMÁTICA / COMPUTER SERVICES

D. Luis Dorado González	Analista Programador (until 20 December 2012)
D. Francisco Daniel Rincon Fuentes	Técnico Especialista de Grado Medio de OPIS
D. Andrés Ubiña Pérez	Técnico Superior de Gestión y Servicios Comunes JAEI/EM (until 15 September 2012)

MANTENIMIENTO / MAINTENANCE

Dña. Belén Palero Fernández	Ayudante de Investigación OPI
D. Fernando Pueyo García	Técnico Especialista Grado Medio OPI
D. Héctor Bueno Duran	Técnico Superior de Actividades Técnicas y Profesionales

PROYECTOS Y DELINEACIÓN / PROJECTS AND DELINEATION

D. Andrés de Frutos Gómez	Titulado Técnico Especializado
---------------------------	--------------------------------

TALLER MECÁNICO / MECHANICAL WORKSHOP

D. Luis Ángel de Prado Serrano	Ayudante de Investigación
--------------------------------	---------------------------

TALLER ÓPTICO / OPTICAL WORKSHOP

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.
- Física Nuclear Teórica: Estructura y Reacciones.
- Químico-Física Teórica aplicada a la Astrofísica.

SUBLÍNEAS DE INVESTIGACIÓN:

- Gravedad y Cosmología Cuántica de lazos.
- Relatividad General Clásica y Cuántica.
- Métodos computacionales en Física Gravitacional.
- Análogos de agujeros negros en Materia Condensada.
- Sistemas mesoscópicos y fuertemente correlacionados.
- Procesos electrodébiles en el núcleo.
- Estructura nuclear con métodos autoconsistentes de campo medio correlacionado.
- Técnicas de tres cuerpos en Física Nuclear.
- Reacciones de interés en Astrofísica Nuclear.
- Espectroscopia teórica de especies moleculares de interés astrofísico y atmosférico.
- Colisiones inelásticas no reactivas a bajas temperatura.

TÉCNICAS UTILIZADAS:

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

LABOR INVESTIGADORA:

GRAVITACIÓN

El Grupo de Gravitación y Cosmología ha continuado durante este año su labor investigadora de los efectos de las inhomogeneidades en Cosmología Cuántica. Esta labor se ha desarrollado en dos frentes. Por un lado, se ha realizado un estudio pormenorizado de la cuantización de campos escalares en espaciotiempos curvos no estacionarios, situación genérica en cosmología. Este estudio ha llevado a obtener potentes teoremas sobre la unicidad de la cuantización cuando se imponen dos requisitos bastante naturales: por un lado, que el vacío de la teoría sea invariante bajo las simetrías espaciales de las ecuaciones de campo; por otro, que la dinámica cuántica sea unitaria, para preservar la interpretación convencional de la Mecánica Cuántica. Se ha estudiado con especial detalle el caso de espaciotiempos con secciones compactas de topología plana, por su interés físico, ya que las observaciones actuales del Universo apuntan a su planitud espacial. Así, se ha demostrado la unicidad tanto de la representación de Fock empleada en la cuantización, como de la elección de un par canónico para el campo cuando se permiten transformaciones canónicas dependientes del tiempo en el sistema. Es natural considerar estas transformaciones en fondos no estacionarios. Su inclusión modifica la dinámica, y conllevaría una ambigüedad en la descripción seleccionada para el campo de no ser por los resultados de unicidad mencionados.

Las conclusiones alcanzadas en el caso de topología plana han sido extendidas luego para cualquier topología espacial compacta, alcanzando conclusiones de una generalidad destacable. Estos teoremas de unicidad dan fortaleza a las predicciones físicas de la teoría, que de otra forma estarían plagadas de una ambigüedad infinita. Dentro del ámbito de campos en espaciotiempos curvos no estacionarios, se ha desarrollado también un formalismo teórico para la descripción de perturbaciones cosmológicas en modelos de tipo Bianchi III y libres de cizalladura. Este formalismo permite afrontar el estudio de perturbaciones primordiales en escenarios con anisotropía y discutir las posibles consecuencias observacionales, estudio de alto interés dadas las recientes indicaciones de que podrían existir ejes privilegiados en cosmología.

Asimismo, se ha estudiado la teoría de perturbaciones cosmológicas en espacios isótropos y homogéneos, convencionales en cosmología, aplicando los resultados del Grupo sobre la unicidad de la cuantización de Fock a tales perturbaciones. Aún más, se ha combinado esta cuantización de Fock privilegiada con la cuantización del fondo homogéneo e isótropo mediante técnicas de lazos, dentro del marco de la Cosmología Cuántica de Lazos (Loops). Esta técnica de cuantización híbrida, desarrollada por el Grupo del IEM, ha permitido un modelo cuántico completo y consistente para la descripción de perturbaciones primordiales en un Universo con un contenido material proporcionado por un campo escalar masivo, para el que se sabe que existen regímenes en los que se genera suficiente inflación, proporcionando así un escenario físicamente realista.

Continuando con aspectos relacionados con teoría cuántica de campos en espacios curvos, se han comparado explícitamente las estructuras del tensor de energía-momento renormalizado de un campo escalar sin masa en un espaciotiempo unidimensional obtenidas mediante dos estrategias diferentes: la construcción de modos normales del operador campo y la acción efectiva a un loop. Así, se ha visto que estos dos esquemas dan los mismos resultados mediante la correspondencia adecuada. También se han revisado algunos de los modelos de cuantización con formalismos híbridos propuestos en la literatura, con el objetivo de extraer sus características comunes. En particular, se ha visto que esos formalismos requieren en general tener en cuenta grados de libertad adicionales a los esperados en una cuantización directa del sistema.

Por otro lado, se ha analizado el entrelazamiento cuántico de un estado inicial de un campo en un espaciotiempo de colapso gravitatorio y se ha discutido el tipo de problemas que se pueden discutir con el formalismo presentado, así como las posibles líneas de investigación futura. Desde otro punto de vista, un estado de vacío en un agujero negro puede analizarse en términos de cómo se percibe por distintos observadores mediante el uso de una función de temperatura efectiva. Se ha encontrado una expresión analítica general para esta temperatura, que depende del estado de vacío, de la posición, de la velocidad local y de la aceleración del observador en cuestión. También se ha proporcionado una interpretación física de las distintas cantidades que aparecen en dicha expresión e ilustrado su interés con algunos ejemplos.

Otra línea de investigación desarrollada ha sido la referente a espaciotiempos cuánticos efectivos con geometría multifractal, cuyas propiedades cambian al variar de la escala observacional. Los objetivos principales consisten en construir una teoría auto-consistente de dinámica cuántica de campos y hallar sus propiedades de renormalización, y con ello desarrollar un formalismo de gravedad clásica en espaciotiempos multifractales, para estudiar escenarios cosmológicos y su fenomenología.

En cuanto al estudio de la entropía de los agujeros negros en Gravedad Cuántica de Lazos, se ha comenzado un programa de estudio riguroso de las teorías cuánticas de campos en presencia de fronteras, concentrado especialmente en su tratamiento Hamiltoniano. Uno de los problemas conceptuales más importantes en este aspecto es el relacionado con la interpretación de los grados de libertad a cuya existencia se atribuye la aparición de la entropía. Los agujeros negros en GCL se modelizan mediante la introducción de los llamados horizontes aislados. En el momento presente se interpreta que, desde el punto de vista clásico no hay grados de libertad que puedan ser asignados de manera exclusiva a la frontera y que, por tanto, los grados de libertad que dan cuenta de la entropía tienen que tener, por fuerza, un origen puramente cuántico. El problema con este punto de vista es que la identificación de los grados de libertad clásicos requiere de un tratamiento Hamiltoniano riguroso, que incorpore en particular los aspectos necesarios relacionados con los espacios funcionales a los que pertenecen los campos clásicos. Para lograr este objetivo no bastan los métodos basados en el algoritmo de Dirac tradicional sino que es necesario recurrir a métodos geométricos adaptados al carácter infinito-dimensional de los espacios de configuración de las teorías de campos. Entre estos métodos hay que destacar el algoritmo geométrico de Gotay-Nester-Hinds. En un primer paso se ha utilizado este formalismo para describir teorías lineales con fronteras, con el objetivo de determinar si las condiciones de contorno admiten una interpretación como ligaduras en el sentido tradicional. Los modelos considerados hasta la fecha han sido los campos escalares y electromagnético con condiciones de contorno de tipo Dirichlet y Robin y se han caracterizado completamente las variedades diferenciales de ligadura en las que se desarrolla la dinámica junto con la descripción precisa de los Campos de vectores Hamiltonianos. Para ello ha sido necesario encontrar el tipo de espacios funcionales apropiados (espacios de Sobolev asociados a los distintos operadores diferenciales que aparecen). En el momento actual se están extendiendo estos resultados a teorías parametrizadas para poder entender en detalle aspectos asociados con su cuantización polimérica.

SISTEMAS MESOSCOPICOS Y FUERTEMENTE CORRELACIONADOS

Grafeno

En el camino hacia una electrónica molecular basada en el carbono, hay algunas peculiaridades de la hoja de grafeno que pueden representar un obstáculo para el diseño de dispositivos electrónicos eficientes, siendo tal vez el más importante la ausencia de una brecha de energía en el espectro electrónico. Con todo, la cuestión acerca del posible uso del grafeno como una alternativa a los semiconductores convencionales es muy discutida en estos momentos. La investigación del sistema electrónico se enfrenta al difícil problema de predecir los efectos de una fuerte interacción electrón-electrón, que tiene el potencial para inducir grandes correlaciones y la consiguiente formación de fases ordenadas de carga, corriente y espín. A este respecto, el propósito de la investigación llevada a cabo durante el último año ha tenido dos vertientes, pretendiendo mostrar que (a) la monocapa de grafeno es susceptible de tener una transición con condensación de corrientes circulares microscópicas, llevando a la aparición de corrientes electrónicas persistentes a lo largo de dominios macroscópicos bajo condiciones apropiadas, y (b) las bicapas de grafeno pueden desarrollar inestabilidades ferromagnéticas y superconductoras en configuraciones con un ángulo de rotación relativa, como resultado de la densidad de estados divergente acumulada en dichos sistemas a bajas energías.

En lo referente a la monocapa de grafeno, hemos demostrado que la generación dinámica de un término de masa rompiendo la invariancia bajo paridad puede tener lugar en la teoría de fermiones de Dirac del grafeno, asumiendo que la repulsión coulombiana de largo alcance es la interacción relevante entre los electrones. En este estudio, la ruptura dinámica de simetría ha sido investigada analizando el correspondiente parámetro de orden y comparándolo con el efecto más convencional de condensación excitónica que rompe la simetría quiral pero preserva paridad. La generación usual de masa invariante bajo paridad corresponde a la condensación de una densidad fermiónica alternante. Hemos demostrado ahora que la masa rompiendo invariancia bajo paridad puede también surgir dinámicamente para una intensidad suficientemente fuerte de la interacción, inducida por un valor esperado distinto de cero de la corriente fermiónica circular. Calculando en la aproximación de diagramas en escalera, la intensidad crítica de la interacción para el desarrollo de la masa rompiendo paridad resulta estar por debajo de la intensidad crítica para la condensación excitónica. Hemos visto que estos acoplos críticos aparecen como valores límite en la definición de los correladores electrónicos relevantes, cuyas series perturbativas tienen radios de convergencia finitos. Así, hemos analizado la ruptura dinámica de simetría calculando las funciones vértice para los operadores que dan los respectivos parámetros de orden. Hemos comprobado que este procedimiento de sumar la serie de diagramas en escalera proporciona una formulación consistente de la ruptura dinámica de simetría, en tanto que conduce a un acoplo crítico para la inestabilidad excitónica que coincide exactamente con el valor obtenido a partir de la resolución de la ecuación de la brecha de energía (disponible en este caso sólo en ausencia de correcciones de auto-energía del electrón). La fiabilidad del esquema diagramático de la teoría de muchos cuerpos se ha visto reafirmada por el hecho de que la suma de diagramas en escalera, complementada por correcciones de auto-energía del electrón, resulte preservar automáticamente la invariancia *gauge* subyacente de la teoría. Esto ha podido ser mostrado explícitamente con el cálculo del vértice de la corriente electrónica, cuyas correcciones coinciden exactamente con las de la renormalización de la velocidad de Fermi, como es requerido por la invariancia *gauge*.

En cuanto a las bicapas de grafeno rotadas, hemos investigado las fases fuertemente correlacionadas que pueden aparecer en tales sistemas como consecuencia de la gran densidad de estados que acumulan a baja energía. Previamente, ya habíamos demostrado que el acoplo entre capas juega el mismo papel que un campo *gauge* a lo largo de las bicapas rotadas, explicando de esta manera la aparición recurrente de sub-bandas planas en torno a energía cero en estos sistemas. Hemos hecho ahora hincapié en el hecho de que estas sub-bandas deben conducir a fuertes correlaciones electrónicas, con tendencia a desarrollar inestabilidades ferromagnéticas y superconductoras, en tanto que inducen la aparición en el espectro electrónico de una singularidad de Van Hove (ya observada experimentalmente) con densidad de estados divergente. Hemos analizado la viabilidad de una inestabilidad superconductoras a partir de una interacción electrón-electrón puramente repulsiva, desarrollando ideas que fueron propuestas hace ya tiempo por W. Kohn y J. M. Luttinger. En nuestro caso, el apareamiento entre electrones depende de la capacidad de poder ajustar el nivel de Fermi a la proximidad de la densidad de estados divergente en el espectro electrónico. Hemos comprobado que el efecto de los puntos de silla de la dispersión electrónica es capaz de producir entonces una fuerte modulación en el apantallamiento de la interacción de Coulomb a lo largo de la línea de Fermi, induciendo a su vez algunos acoplos negativos (atractivos) cuando se proyecta la interacción efectiva en los diferentes modos normales de acuerdo con la simetría de la dispersión electrónica. Esta interacción atractiva es suficiente para desencadenar la inestabilidad superconductoras, si bien la magnitud de los acoplos negativos puede depender del ajuste preciso del nivel de Fermi a la singularidad de Van Hove y de otros factores como el desorden en el sistema. Hemos confrontado también esta inestabilidad de apareamiento electrónico con la posibilidad de tener una inestabilidad magnética a partir de la alta densidad de estados. La tendencia hacia el antiferromagnetismo ha sido descartada en la

estructura de superred de las bicapas rotadas, puesto que los estados de baja energía tienden a confinar la carga con la formación de una red triangular de puntos cuánticos (como se observa experimentalmente). Un estudio preliminar ha mostrado sin embargo que la densidad de estados divergente al llenado de la singularidad puede desencadenar una inestabilidad ferromagnética, consistente con la aparición de una fuerte susceptibilidad magnética uniforme que puede ser aumentada arbitrariamente bajando de manera progresiva la temperatura y ajustando el nivel de Fermi a la singularidad de Van Hove.

Modelos exactamente solubles

El modelo de Lipkin-Meshkov-Glick (LMG) fue introducido en física nuclear en la década de los 60 para describir el comportamiento de núcleos de capa cerrada. Con posterioridad, este modelo ha demostrado ser extremadamente útil para probar aproximaciones al problema de muchos cuerpos en otras áreas de la física como sistemas cuánticos de espín, trampas iónicas, condensados de Bose-Einstein en trampas dobles y en circuitos que modelan la QED. También el modelo se utilizó para estudiar transiciones de fase cuánticas, propiedades de entrelazamiento y decoherencia cuántica. Nosotros mostramos que el modelo es un límite particular de los modelos integrables de Richardson-Gaudin (RG) y estudiamos su diagrama de fases con transiciones de 1º, 2º y 3º orden en términos de las raíces de las ecuaciones de RG que determinan completamente la función de onda exacta del estado fundamental.

Transporte cuántico

Estudiamos el efecto de las fuertes correlaciones en el transporte a través de puntos cuánticos y si podían ser la causa de la transición entre el régimen mesoscópico y el régimen universal en el comportamiento de la fase de transmisión a través de puntos cuánticos, medida mediante interferometría de Aharonov-Bohm. Para el cálculo de la conductancia utilizamos el método de embebido en combinación con el algoritmo del grupo de renormalización de la matriz densidad. Los resultados muestran que aumentando la intensidad de la interacción electrónica disminuimos la anchura de las resonancias de bloqueo de Coulomb y las separamos unas de otras pero no inducimos una transición entre el régimen mesoscópico y el régimen universal de la fase ni cambiamos de forma sistemática el número de ceros de la transmisión. Estos resultados apoyan nuestro trabajo anterior en el que mostramos que las correlaciones en las funciones de onda debido a la caoticidad de los puntos cuánticos y no las correlaciones electrónicas debido a las interacciones eran las responsables de la transición entre los regímenes mesoscópico y universal.

Mapa de bosones compuestos para modelos de bosones en redes

Presentamos un mapa que transforma operadores bosónicos en un producto cuadrático de "bosones compuestos". El mapa es canónico y conserva los elementos de matriz de operadores físicos al aplicar la resolución de identidad de los nuevos operadores (ligadura física). Como primera aplicación, transformamos el modelo de Bose-Hubbard en dos dimensiones en un hamiltoniano de bosones compuestos 2×2 . El diagrama de fase "aislante de Mott -- superfluido" que obtenemos mediante la aproximación de campo medio para bosones compuestos está en notable acuerdo con el obtenido mediante Monte-Carlo Cuántico y compete muy bien con otras aproximaciones punteras, en las cuales el coste computacional es más elevado. Este nuevo formalismo será utilizado para el estudio de átomos bosónicos fríos en redes ópticas con frustración para los cuales el método de Monte Carlos es inaplicable debido a problemas de signo.

FÍSICA NUCLEAR TEÓRICA

Efectos de la deformación nuclear en distribuciones de Gamow-Teller

La respuesta de espín-isospín Gamow-Teller (GT) del núcleo es una fuente de información única no sólo en física nuclear sino también en astrofísica y física de partículas. En el caso de núcleos inestables esta información se extrae experimentalmente de desintegraciones beta con la limitación que determina el balance energético. En el caso de núcleos estables o próximos a la estabilidad, la intensidad de GT se obtiene a través de reacciones de intercambio de carga a energías intermedias de los proyectiles y ángulos hacia delante. En estas condiciones los estados nucleares son sondeados a momentos transferidos pequeños y las secciones eficaces son proporcionales a los elementos de matriz GT sin las restricciones energéticas propias de la desintegración beta. Las propiedades GT en los núcleos ^{76}Ge y ^{76}Se se encuentran entre las más estudiadas tanto teórica como experimentalmente debido a su relevancia en los procesos de doble desintegración beta para determinar la naturaleza del neutrino y su masa absoluta.

Hemos estudiado las posibilidades que ofrecen modelos basados en las aproximación de fases al azar de cuasipartículas (quasiparticle random phase approximation, QRPA) para la descripción conjunta de toda la

información disponible que existe sobre (i) las propiedades globales de la respuesta GT tales como la intensidad total de GT y la localización energética de la resonancia, (ii) la distribución de la intensidad GT en los estados excitados más bajos que están determinados experimentalmente con gran resolución y (iii) los elementos de matriz de la doble desintegración beta con emisión de dos neutrinos ($2\nu\beta\beta$) y las implicaciones de cada una de las ramas de desintegración en esos procesos. Más en concreto, hemos estudiado las distribuciones GT en el núcleo hijo ^{76}As alcanzado a través de ^{76}Ge y ^{76}Se en una aproximación QRPA con fuerzas residuales en los canales partícula-agujero y partícula-partícula. El campo medio se obtiene autoconsistentemente mediante cálculos de Hartree-Fock con fuerzas de Skyrme (SLy4) y correlaciones de apareamiento. Utilizando este formalismo se logra un acuerdo muy razonable con la información experimental sobre distribuciones GT en las dos ramas de cada desintegración beta obtenidas en reacciones de intercambio de carga (p,n) y (n,p) o sus asociadas ($^3\text{He},t$) y ($d,^2\text{He}$) en alta resolución. De igual modo, el acuerdo con el elemento de matriz $2\nu\beta\beta$ extraído de las vidas medias experimentales es también satisfactorio. La deformación nuclear desempeña un papel fundamental para entender la distribución de la intensidad GT y el proceso $2\nu\beta\beta$ en el que la diferencia entre las deformaciones del padre y del hijo introduce un factor de reducción en los elementos de matriz que acerca el cálculo al experimento.

Evolución de la estructura nuclear con el número de nucleones

Hemos continuado con el estudio de la evolución nuclear con especial énfasis en la evolución de la forma nuclear en función del número de nucleones que está recibiendo un gran interés en los últimos años tanto teórica como experimentalmente. Hemos estudiado propiedades globales y espectroscópicas en cadenas de isótopos pares e impares en diversas regiones de masa mediante formalismos 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. Mediante estos métodos se han determinado las superficies de energía a través de cálculos triaxiales que permiten tener una visión global de la energía del núcleo en función de los parámetros de deformación cuadrupolares. Mediante este formalismo pueden estudiarse propiedades básicas del estado fundamental del núcleo como energías de ligadura, deformaciones nucleares, energías de separación de dos neutrones, radios cuadráticos de carga o asignaciones de espín y paridad que permiten establecer la evolución de la estructura nuclear. No obstante para describir apropiadamente la espectroscopía nuclear es necesario ampliar este formalismo con métodos que van más allá del campo medio como restauración de simetrías rotas mediante métodos de proyección o mezcla de configuraciones a través de cálculos de la coordenada generatriz que son en general muy costosos numéricamente. Una alternativa a estos métodos que ha sido explotada en este trabajo es la construcción de un hamiltoniano en términos de grados de libertad bosónicos (modelo IBM) que permite describir las propiedades espectroscópicas de una manera sencilla. Los parámetros de este Hamiltoniano IBM se han obtenido de tal manera que reproduzcan las superficies de energía microscópicas mencionadas anteriormente con los métodos de campo medio autoconsistente de tal manera que recobramos las buenas propiedades de los métodos HFB con la ventaja de poder al mismo tiempo describir la espectroscopía. Se han realizado varias aplicaciones de este método en regiones con $A=180-200$ y en isótopos ricos en neutrones de Kriptón.

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”.

Más concretamente, durante los últimos meses nuestro trabajo se ha centrado fundamentalmente en los siguientes dos aspectos: En primer lugar, en el estudio de la reacción triple alfa y su tasa de producción a temperaturas muy bajas. El hecho de que en estas condiciones las energías relativas involucradas sean también muy bajas, claramente por debajo de la resonancia 0^+ en ^8Be , implica que la descripción secuencial del proceso a través de dicha resonancia no es obvia. De hecho, hemos encontrado que una descripción a través de una captura directa, sin poblar estados de dos cuerpos intermedios, puede dar lugar a un incremento de la tasa de producción

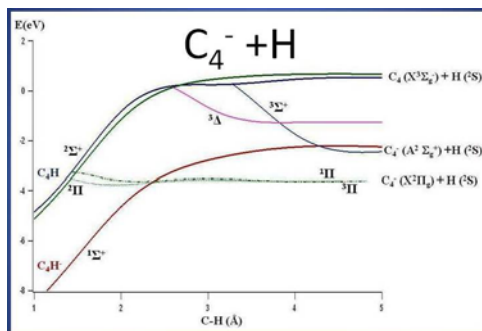
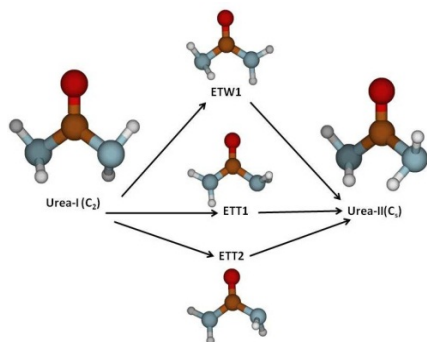
de hasta 7 órdenes de magnitud para una temperatura de 10^7 GK. Hemos estudiado también los procesos de bremsstrahlung en ^8Be , cuyo conocimiento es necesario a la hora de extender el estudio de este tipo de emisión gamma a ^{12}C . El segundo de los aspectos investigados se refiere a la descripción de reacciones 1+2 mediante el uso de las dos relaciones integrales desarrolladas recientemente. Hemos encontrado que este método es altamente eficiente para describir procesos por debajo de la energía umbral para la ruptura del blanco.

Lógicamente, el siguiente paso ha de ser el investigar la validez del método para describir reacciones por encima de este umbral, que llevan por tanto a la ruptura del blanco. Esto ha sido llevado a cabo recientemente, estudiándose procesos de ruptura en colisiones neutrón-deuterón, y reacciones atómicas entre átomos de ^4He a temperaturas muy bajas, hasta del orden del μK .

QUÍMICO-FÍSICA TEÓRICA APLICADA A LA ASTROFÍSICA

Durante el año 2012, 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, ALMA and SOFIA.

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 pequeños 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 ($\text{X}=\text{N}, \text{H}$). 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 el C_6^- y los procesos de formación de los sistemas tipo C_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- Hemos iniciado también estudios estructurales y vibracionales de cianuros e isociaburos metálicos. En el caso de los aniones, hemos establecido una regla general que permite distinguir entre aniones detectables y no-detectables.



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 han propuesto como moléculas interestelares la Urea y el acetato de metilo 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 Paris-Este Créteil. Se ha prestado atención a las variedades isotópicas monosustituidas del propano, acetato de metilo, urea, y dimetil-eter. El propano es una especie básica para comprender la química de la atmósfera de Titán.

Finalmente, se ha finalizado el estudio de la colisión a muy bajas temperaturas del C_2H (anión y neutro) con para y orto H_2 y He. 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. Los parámetros se obtienen en cálculos de dinámica molecular que emplean como datos de entrada, superficies de potencial de Van der Waals que a su vez se determinan con cálculos ab initio muy precisos. De los trabajos se deduce información importante referente a la comparación de comportamientos de aniones y formas neutras.

2A.2 DPTO. DE ESPECTROSCOPIA NUCLEAR, VIBRACIONAL Y DE MATERIA DESORDENADA/ NUCLEAR, VIBRATIONAL AND DISORDERED MEDIA SPECTROSCOPY

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

SUBLÍNEAS DE INVESTIGACIÓN:

- Estudios espectroscópicos de núcleos ligeros próximos a la línea de estabilidad.
- 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.
- 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.
- Plasmónicas en nanoestructuras metálicas.
- Metamateriales en el dominio óptico.
- Nanofotónica de nanohilos semiconductores.

- Resonancias plasmónicas en nanoestructuras metálicas (nanoantenas): Raman y Fluorescencia.
- Espectroscopía de Plasmas de Ablación inducidos por Radiación Láser Infrarroja.
- Espectroscopía de Ruptura Dieléctrica en Plasmas inducidos por Láser (LIBS).

TÉCNICAS UTILIZADAS:

- Desintegración beta de núcleos exóticos producidos por el método ISOL, en la instalación ISOLDE y REXISOLDE@.
- 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 mecánico en CATIA.
- Métodos computacionales y Matemáticas.
- Análisis de experimentos en Física Nuclear Experimental.
- Simulación numérica.
- Métodos Computacionales.
- Dispersión de neutrones.
- Técnicas calorimétricas.
- Medidas de Adsorción.
- Física Teórica (Electrodinámica Clásica).
- Espectroscopía Infrarroja (FTIR, micro IR y SEIR).
- Espectroscopía de Ruptura Dieléctrica (LIBS).
- 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.
- Técnicas portátiles (Raman portátil).
- Deposición asistida por láser.
- Relaxometría de RMN de bajo campo.

LABOR INVESTIGADORA:

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

Estudios de estados no ligados en el ^{16}O usando la reacción $^{19}\text{F}(p,\alpha\gamma)^{16}\text{O}$

Proyecto EUROGENESIS EUROCORES-EUI-2009-04162. (Dra. contratada Ana Becerril)

Se ha realizado un estudio de posibilidad de usar la reacción nuclear inversa $^{19}\text{F}(p,\alpha\gamma)^{16}\text{O}$ para determinar las anchuras de los estados no ligados para la emisión de α , esenciales en la reacción de captura radiactiva directa de $^{12}\text{C}(\alpha, \gamma)^{16}\text{O}$.

El experimento sobre la reacción $^{19}\text{F}(p,\alpha\gamma)^{16}\text{O}$ se llevó a cabo en el Centro de Micro-Análisis de Materiales (CMAM) de la Universidad Autónoma de Madrid (UAM) (España). Un haz de protones mono energéticos con energía comprendida entre 800 KeV- 3.000 KeV interaccionaron con un blanco de 120 $\mu\text{g}/\text{cm}^2$ de MgF_2 (en un soporte de ^{12}C de 10 $\mu\text{g}/\text{cm}^2$). Se utilizó un sistema de detectores de silicio segmentados $\Delta E - E$ para poder simultáneamente medir el ángulo y la energía de las partículas salientes. Este montaje experimental cubre ángulos delanteros en el rango comprendido entre 37° y 64° y entre 115° y 156° en la dirección trasera, que permitió la detección de partículas emitidas en 180° en coincidencia. Así, el objetivo principal de este análisis es identificar dos partículas α junto con (idealmente) el ^{12}C de retroceso en coincidencia. De especial interés son las partículas α que pueblan los estados 2+ y 1- del ^{16}O , localizados a 6917 KeV y 7116 KeV respectivamente y que son considerados como fundamentales en los procesos de captura radiativa. También es de crucial importancia identificar y eliminar las coincidencias aleatorias.

La reacción $^{12}\text{C}(\alpha, \gamma)^{16}\text{O}$ es de gran importancia para la Astrofísica Nuclear debido al papel tan relevante que juega en la determinación de la proporción que hay de carbono que se transforma a oxígeno que ocurre en las explosiones de He en las estrellas. Además afecta también a la nucleosíntesis de los elementos más allá de $A=16$ en las etapas tardías de combustión. Son muchos los estudios que se han dedicado a la investigación de la reacción $^{12}\text{C}(\alpha, \gamma)^{16}\text{O}$,

mediante la determinación de las anchuras que han de los sub-estados α . El análisis de datos está realizándose en la actualidad.

ESTUDIOS DE LA SECCIÓN EFICAZ DE LA REACCIÓN ${}^4\text{He}({}^3\text{He},\gamma){}^7\text{Be}$ Proyecto FPA2009-07387, (doctorando JAE-predoc. M. Carmona-Gallardo)

Durante los últimos años, nuestro grupo ha estado interesado en el estudio de la sección eficaz de la reacción nuclear ${}^4\text{He}({}^3\text{He}, \gamma){}^7\text{Be}$. Esta reacción juega un papel fundamental tanto en el *Modelo Solar Estándar*, puesto que constituye una de las mayores fuentes de error dentro de los parámetros nucleares, como en la Nucleosíntesis del Big-Bang, para resolver el problema de la abundancia del ${}^7\text{Li}$ primordial en el universo. Este año se han publicado los resultados obtenidos con el experimento realizado en el CMAM en el que utilizamos la técnica de activación consistente en la detección de la radiación gamma procedente de la de-excitación primer estado excitado del ${}^7\text{Li}$ procedente de la desintegración del ${}^7\text{Be}$ colectado (M. Carmona-Gallardo et al. PRC 86, 032801(R) (2012)). Estos nuevos resultados resuelven las discrepancias existentes a energías intermedias confirmando por ejemplo los nuevos cálculos ab-initio realizados por T. Neff. (T. Neff, Phys. Rev. Lett. 106, 042502 (2011)).

En colaboración con la Universidad de York, en Reino Unido, el Instituto Weizmann de Israel y TRIUMF en Canadá, nuestro grupo ha realizado un experimento complementario al anterior utilizando el espectrómetro DRAGON en TRIUMF. En dicho experimento determinaremos la sección eficaz de la misma reacción mediante una técnica alternativa de medida, consistente en la detección directa del ${}^7\text{Be}$ en un detector DSSSD colocado en el plano focal al final de espectrómetro. Este experimento se ha realizado utilizando cinemática inversa, esto es, con un blanco gaseoso de ${}^3\text{He}$ y un haz de ${}^4\text{He}$.

Dicho experimento tiene además la dificultad añadida de contar de un blanco gaseoso sin ventana por lo que el perfil de la densidad del blanco se ha determinado experimentalmente utilizando la reacción ${}^{12}\text{C}({}^3\text{He}, \square)$. Por otra parte la aceptación geométrica del separador es más pequeña que la estimada mediante cálculos cinemáticos, por tanto se están realizando simulaciones para determinar la aceptación de DRAGON para esta reacción a las diferentes energías estudiadas experimentalmente. El estudio de la sección eficaz de esta reacción nuclear mediante el uso de las dos técnicas experimentales constituirá el trabajo de tesis de Mariano Carmona Gallardo que será defendida en el año 2013.

EXPERIMENTO S393 R3B@GSI: NÚCLEOS RICOS EN NEUTRONES MÁS ALLÁ DE LA LÍNEA DE GOTEÓ.

Proyecto FPA2009-07387 (doctorando FPI2010 G. Ribeiro)

En el contexto de la colaboración internacional R3B, hemos estudiado haces radioactivos acelerados a energías de 490 MeV/u dejándoles impactar sobre un blanco de protones (CH_2) para poder estudiar reacciones de transferencia de nucleones y así producir un cóctel de núcleos ligeros muy exóticos. El estudiante de doctorado G. Ribeiro está participando en el análisis del experimento y centra el desarrollo de su tesis en el estudio de unos de los canales de reacción más exóticos; en núcleos (resonancias) más allá de línea de goteo como el ${}^{13}\text{Be}$ o el ${}^{16}\text{B}$ que se produjeron en el experimento. Este tipo de núcleos son buenos laboratorios para entender los límites de la estructura nuclear, produciéndose fenómenos que no se encuentran en otros sitios de la carta de núcleos, como la aparición de nuevos números mágicos, halos y los estados no-ligados, lo que permite entender mejor la interacción entre nucleones en el interior del núcleo.

Los estados no-ligados de los núcleos más allá de la línea de goteo de neutrones tienen una vida media del orden de los nanosegundos, lo que hace imposible su detección directa. Esto significa que es necesario tener medidas en cinemática completa, es decir detectar la energía y ángulo del haz entrante al igual que detectar la trayectoria y la energía de todos los fragmentos de dispersión. Este tipo de medida requiere un sistema de detección experimental con una gran cantidad de detectores, estos han sido calibrados a largo del año pasado permitiendo ahora centrarse en obtener resultados físicos a lo largo del año 2013.

ESTUDIO DE LA POLARIZABILIDAD DIPOLAR DE NÚCLEOS LIGEROS

Uno de los descubrimientos más importantes e inesperados de la Física Nuclear reciente ha sido la existencia de un halo neutrónico en algunos núcleos próximos o en la línea de estabilidad (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 (o clúster/grupo de nucleones) alejarse y tener una probabilidad no despreciable a distancias mucho mayores que el radio nuclear normal ($= r_0 A^{1/3}$, $r_0 = 1.2$ fm), aumentando su polarizabilidad.

El parámetro de polarizabilidad es una propiedad fundamental del núcleo y es una medida de su respuesta a un campo eléctrico externo. En el límite adiabático (que corresponde a energías de excitación altas), la sección eficaz de dispersión elástica se desvía de la predicción de la fórmula de Rutherford proporcionalmente a la intensidad de la polarizabilidad dipolar. Por lo tanto, al medir la sección eficaz de dispersión elástica de un núcleo contra un blanco pesado a energías sub-Colombianas, podemos determinar el parámetro de polarizabilidad de éste núcleo. Este año hemos terminado el análisis del experimento E1104 sobre ^{11}Li (ver la memoria 2011) y tomado nuevos datos con el experimento S1202, los avances se explican a continuación.

EXPERIMENTO S1104: ESTUDIO DEL EFECTO HALO EN LA DISPERSIÓN DE ^{11}Li CON UN BLANCO PESADO A ENERGÍAS ALREDEDOR DE LA BARRERA COLOMBIANA

Proyecto FPA2009-07387 (doctorando contratado Mario Cubero)

Se presenta la primera medición de la dispersión elástica de la ^{11}Li de núcleo de halo y su core ^9Li sobre ^{208}Pb a energías alrededor de la barrera Colombiana. La dispersión elástica $^{11}\text{Li} + ^{208}\text{Pb}$ muestra una fuerte reducción con respecto a la sección eficaz de Rutherford, incluso en energías muy por debajo de la barrera y hasta ángulos de dispersión muy pequeños. Este cambio drástico del sección eficaz elástico diferencial observado en $^{11}\text{Li} + ^{208}\text{Pb}$ es la consecuencia de la estructura de halo de ^{11}Li , como no se observa en la dispersión elástica de su core ^9Li a las mismas energías.

Four-body continuum-discretized coupled-channels calculations, basados en un modelo de tres cuerpos del proyectil ^{11}Li , puede explicar la distribución angular medida y confirmar que la reducción observada es principalmente debido al fuerte acoplamiento Colombiana a los estados de dipolo en el bajo continuo de ^{11}Li . Estos cálculos sugieren la presencia de una resonancia de dipolo a bajas energías en ^{11}Li cerca del umbral de ruptura. Este trabajo forma parte de la tesis de Mario Cubero que defendió excelentemente el 22 de diciembre de 2012.

EXPERIMENTO S1202: ESTUDIOS DEL EFECTO HALO EN LA DISPERSIÓN DE ^{11}Be CON UN BLANCO PESADO

Proyecto FPA2009-07387 (doctorando contratado Vicente Pesudo)

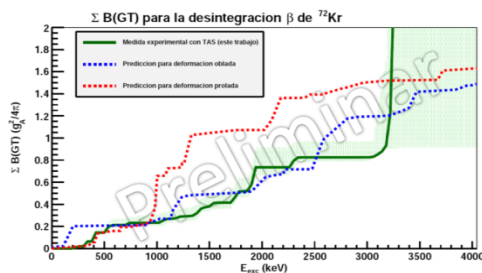
Se ha iniciado el estudio del núcleo con halo ^{11}Be . Un núcleo con halo se caracteriza por, en lugar de tener una densidad homogénea como la gran mayoría, constar de un 'core' compacto, y tener uno o dos nucleones con una función de onda que se extiende a radios mayores, lo que conlleva que el volumen de los núcleos halo sea muy superior al de otros núcleos con el mismo número másico y su superficie más difusa. En el caso de ^{11}Be , el halo es de un solo neutrón. Comparado con el ^{11}Li , que es el otro núcleo halo que se ha estudiado en el grupo y que tiene un halo de 2 neutrones, presenta algunas dificultades añadidas, pero también algunos aspectos destacables. Se trata de un núcleo con una energía de ligadura menor y con un estado excitado a baja energía, lo que dificulta, respectivamente, la producción del isótopo y el estudio de los efectos provocados directamente por el halo. A pesar de eso, el halo de un solo neutrón proporciona un marco único, que permite estudiar cómo interacciona el core con un solo neutrón, abordable como un elemento distinguible del sistema. A día de hoy se ha hecho el cálculo de la probabilidad de ruptura del núcleo contra un blanco de ^{208}Pb a energías alrededor de la barrera Coulombiana y se empieza a trabajar en el estudio de las dispersiones elásticas e inelásticas.

ESTUDIO DE LA DEFORMACIÓN DEL NÚCLEO $N = Z$ ^{72}Kr A TRAVÉS DE DESINTEGRACIÓN β

Proyecto FPA2009-07387 (doctorando FPI2008 J. Briz Monago)

La técnica de Espectroscopia de Absorción Total (TAS) permite medir experimentalmente la distribución de alimentación beta como función de la energía de excitación en el núcleo hijo y a partir de ella deducir la distribución de fuerza Gamow-Teller $B(\text{GT})$. Una aplicación interesante de esta técnica es el estudio de la desintegración de núcleos exóticos con $N=Z$ en la región de masas intermedias ($A=40-100$). En esta región se predicen fuertes cambios de deformación desde esférica a oblada, prolada y vuelta a esférica al recorrer la línea $N=Z$ desde $A=40$ hasta $A=100$. Además, para núcleos $N=Z$ alrededor de $A=70-80$ existen cálculos teóricos que predicen muy diferentes distribuciones de fuerza Gamow-Teller para diferentes deformaciones del estado fundamental del núcleo padre. Así, la comparación de las distribuciones experimentales y la predicción teórica para las diferentes deformaciones puede arrojar luz sobre el tipo de deformación que presentan dichos núcleos.

Con este objetivo, la desintegración beta del núcleo con $N=Z$ ^{72}Kr fue estudiada en ISOLDE (CERN) con "Lucrecia", un Espectrómetro Gamma de Absorción Total (TAS). El análisis de estos datos se ha realizado obteniendo como resultados, entre otros, la distribución de la alimentación beta y a partir de ella la distribución de



Intensidad de fuerza Gamow-Teller, $B(\text{GT})$, acumulada para la desintegración β^+/EC del núcleo ^{72}Kr como función de la energía de excitación en el núcleo hijo, ^{72}Br . La curva verde representa los resultados experimentales obtenidos mediante la técnica TAS mientras que las curvas punteadas azul y roja presentan las predicciones teóricas para deformaciones oblada y prolada respectivamente.

fuerza Gamow-Teller a lo largo de la ventana energética accesible en la desintegración β^+/EC del núcleo ^{72}Kr . Estos resultados experimentales son comparados con cálculos teóricos realizados por Pedro Sarriguren, (Departamento de Química y Física Teóricas, IEM) con el método autoconsistente de Hartree-Fock y aproximación "Random Phase Approximation" (RPA) empleando fuerzas tipo Skyrme. Como hemos mencionado, estos cálculos predicen distribuciones de fuerza Gamow-Teller muy diferentes para el caso en que el estado fundamental del núcleo que se desintegra presentase una deformación oblada (tipo mandarina) o prolada (tipo huevo). De esta forma, simplemente por comparación de experimento-teoría podemos extraer conclusiones sobre el tipo de deformación que presenta dicho núcleo, ^{72}Kr .

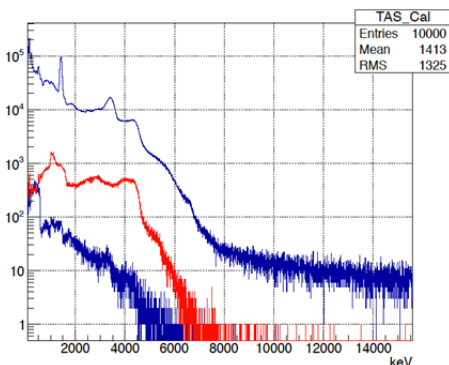
Los resultados experimentales preliminares obtenidos en este trabajo se presentan en la figura. La intensidad de fuerza Gamow-Teller acumulada experimental obtenida favorece la predicción para el caso de deformación oblada del estado fundamental del núcleo ^{72}Kr . Este trabajo, junto con el estudio de la estructura de bajo espín del núcleo hijo de la desintegración beta de ^{72}Kr , es decir, ^{72}Br , a través de espectroscopia de electrones de conversión será el trabajo principal de la tesis doctoral del estudiante José Antonio Briz (becario Predoctoral-FPI) que será defendida a mediados del próximo año.

DEFORMACION NUCLEAR EN LA ZONA CON $Z=82$: DESINTEGRACIÓN β DE $^{182,184,186}\text{Hg}$

Proyecto FPA2009-07387 (doctor E. Nácher)

Los isótopos ligeros (deficientes en neutrones) de Hg han sido objeto de estudio intensivo experimental y teórico desde los 1970s. La razón de este interés es la coexistencia de diferentes formas nucleares a baja energía de excitación en algunos de los isótopos pares, y cambios de forma en los estados fundamentales de los impares. De hecho, la primera evidencia de coexistencia de forma cerca del cierre de capa $Z=82$ se midió en los isótopos de mercurio deficientes en neutrones usando medidas de 'isotope shift'. En esta región además existen cálculos teóricos que predicen distribuciones de intensidad Gamow-Teller: $B(\text{GT})$, muy diferentes dependiendo de la forma que asumen para el estado fundamental del padre. Esta característica puede ser explotada para estudiar el fenómeno de coexistencia de forma si los cálculos teóricos se combinan con una medida precisa de la $B(\text{GT})$ en la desintegración de estos núcleos. En un contexto más amplio, medidas precisas de la $B(\text{GT})$ son importantes para testear los modelos nucleares en la región de $Z=82$.

Para estudiar la desintegración beta de $^{182,184,186}\text{Hg}$ hemos utilizado el espectrómetro de absorción total *Lucrecia*, descrito en el apartado anterior. El experimento ha tenido lugar en diciembre 2012 en la instalación ISOLDE-CERN, donde un blanco grueso de Pb derretido fue bombardeado con protones de energía 1.4 GeV del acelerador PS-Booster.



En la figura vemos el espectro de la desintegración del ^{182}Hg medido sin coincidencias (arriba azul) y con coincidencias en los rayos X (rojo) y con partículas beta (abajo azul). Durante los próximos meses analizaremos estos datos para inferir la forma del estado fundamental de los isótopos ligeros de mercurio.

GANAS DETECCIÓN DE RADIACIÓN GAMMA UTILIZANDO MATERIAL DE CENTELLEO AVANZADO Y NOVEDOSO.

Proyecto ERANET NupNET PRI-PIMNUP-2011-1333. (doctor contratado Jose Sánchez del Rio)

Durante este período se han estudiado experimentalmente los materiales centelladores de LaBr_3 y LaCl_3 para ser utilizados como detectores de partículas cargadas y radiación gamma de alta energía para experimentos de Física Nuclear en medias y grandes instalaciones de aceleradores europeos. Además se han desarrollado nuevas formas de procesamiento y análisis de la señal obtenida a partir de la electrónica utilizada. De la misma forma se han diseñado elaborados montajes electrónicos para dicho procesamiento tan rápido y poder así almacenar los datos experimentales a tiempo real y para su posterior estudio.

Se han realizado simulaciones Montecarlo con programas como Geant4 o R3BRoot al igual que test experimentales en GSI (Darmstadt, Alemania) o en CMAM (Madrid) con detectores rápidos y altamente eficientes de materiales centelladores en configuración phoswich (LaBr_3 y LaCl_3). Los detectores utilizados tienen dos geometrías distintas: uno de ellos tiene forma piramidal truncada con aristas de radio 50 cm, resolución en energía de 3.75 % y resolución angular polar de 2.5° . El otro es una matriz 2x2 cristales planar (Fig. 1 a), cada uno de ellos con forma de prisma rectangular. Ambas configuraciones son phoswich y tiene cristales de 4 cm de longitud de LaBr_3 acoplados ópticamente a continuación a cristales de 6 cm de longitud de LaCl_3 . En la base superior de los cristales de LaCl_3 se acoplan ópticamente a fotomultiplicadores HAMAMATASU R5380 de 8 etapas. Se ha diseñado y fabricado como primer paso a la construcción de la parte delantera del calorímetro CALIFA y que tiene el nombre de CEPA (CALIFA endcap Phoswich array), que puede utilizarse como parte aislada o formando parte del calorímetro.

Ya calibrados los detectores, el detector planar Phoswich fue utilizado en el CMAM (abril-mayo, 2012) para detectar radiación gamma de alta energía (hasta 7 MeV), aprovechando el experimento nuclear de nombre de la reacción $^{19}\text{F}(p,\alpha\gamma)^{16}\text{O}$ anteriormente mencionado. Por otro lado este mismo detector se empleó en el experimento S406 en GSI Alemania (prueba de haz: agosto, 2012, experimento: octubre, 2012) en que se probaron haces de protones y de neutrones de alta energía (200 - 1500 MeV) para los distintos detectores presentes en el montaje experimental de la rama R3B y detectores de grupos externos (Madrid, Munich, Santiago y Göteborg). Estamos trabajando con el desarrollo para el montaje experimental especialmente para la electrónica de adquisición y captura de datos en forma de digitalización directa de las señales de los dinodos para poder separar las señales de los dos cristales del Phoswich independiente.

DESARROLLO DE UN HAZ DE ^{31}Mg PARA ISOLDE Y HIE-ISOLDE

Proyecto FPA2009-07387 (doctor contratado Alexander Gottberg)

El doctor Alexander Gottberg, financiado por el proyecto FPA2009-07387 está trabajando en nuevos desarrollos para la producción de haces radioactivos para la instalación de ISOLDE y la futura instalación HIE-ISOLDE. Dentro de este proyecto el Dr. Gottberg se ha encargado de desarrollar un blanco para la producción del isótopo ^{31}Mg , (ver el enlace <http://www.iem.csic.es/departamentos/nuclear/fnexp/noticias/Gottberg-CERN-Bulletin.pdf>).

FORMACIÓN DE TÉCNICO EN EL AMBITO DE INSTALACIONES EUROPEAS

Proyecto MICINN EIC.-CERN-2011-0022 (R. Lorenzo Ortega)

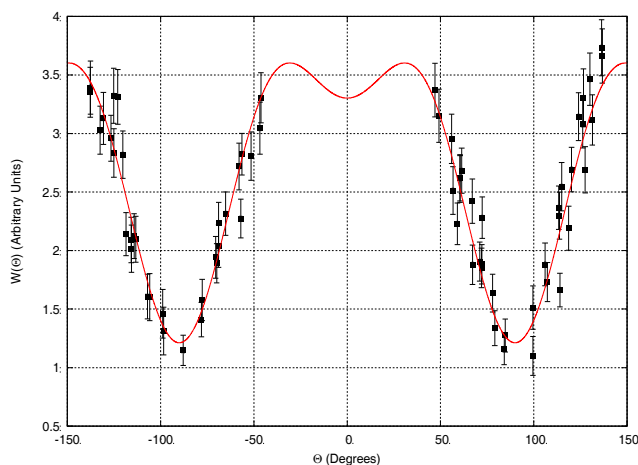
Rubén Lorenzo Ortega, financiado por el Ministerio de Economía y Competitividad con el proyecto EIC.-CERN-2011-0022 (IPs M.J. García Borge/O.Tengblad) para la formación de un técnico en el ámbito de las grandes instalaciones de investigación internacional, está trabajando en nuevos desarrollos y mejoras para el transporte del haz del acelerador PS del CERN. El proyecto donde se encuentra Rubén Lorenzo consiste en la sustitución de los

motores que actualmente existen para los *Kickers* del acelerador PS, por unos nuevos, para aprovechar las prestaciones y avances realizados en los últimos años con los motores. Actualmente existen unos servo-motores antiguos, que causan ciertas vibraciones a la hora de mover el mecanismo de los *Kickers*.

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

FPA2009-13377-C02-02 y FPA2011-29854-C04-01 A. Illana

Los momentos magnéticos son una prueba sensible de las propiedades mono-particulares en el núcleo. Pueden ser medidos mediante la observación de la perturbación inducida por un campo magnético en la correlación angular de los rayos gamma emitidos en la de-excitación del estado nuclear de interés. Las medidas de momentos magnéticos fueron de una importancia primordial en el desarrollo de la estructura nuclear y han sido, y siguen siendo esenciales



para poner a prueba el poder predictivo del modelo de capas nuclear. Dicha técnica ha sido empleada durante varios años para la medida de momentos magnéticos con haces estables, y extender la investigación para núcleos exóticos ha sido la meta de nuestro grupo.

A finales del 2011 A. Junglauss, A. Illana, A. Perea, J. A. Briz y R. Orlandi, en colaboración con investigadores de otros institutos europeos de investigación, llevaban a cabo el experimento IS483 en REX-ISOLDE, CERN, con el objetivo de medir el momento magnético del primer estado excitado 2^+ en el ^{72}Zn . El experimento se realizó con una nueva cámara de reacción desarrollada y construida en el IEM-CSIC.

Figura: Correlación angular del rayo gamma depoblando el estado 2^+ en ^{72}Zn . Los símbolos negros representan los datos experimentales y la línea roja el ajuste de la función $W(\theta)$.

Los datos del experimento actualmente están siendo analizados por A. Illana en el marco de su tesis doctoral, en la siguiente figura se muestra, como resultado previo la correlación angular medida del estado 2^+ del ^{72}Zn .

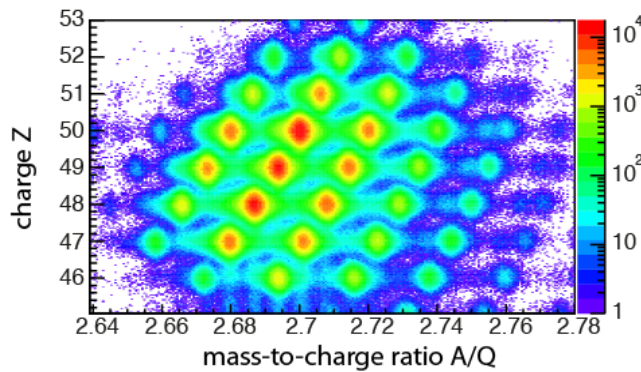
Actualmente, el análisis del experimento está en su etapa final. Esta medida pionera nos permitirá poner a prueba los cálculos del modelo de capas que describen mejor esta región de la tabla de nucleídos.

ESTUDIO DE NÚCLEOS EXÓTICOS EN LA REGION DEL NUCLEO DOBLEMENTE MÁGICO ^{132}Sn MEDIANTE LA ESPECTROSCOPIA DE DESINTEGRACIÓN

FPA2009-13377-C02-02 y FPA2011-29854-C04-01 J. Taprogge

En el contexto de la colaboración internacional EURICA ha sido llevado a cabo el estudio de núcleos exóticos en la región del núcleo doblemente mágico ^{132}Sn por medio de métodos de espectroscopía gamma. Esta región es una de las más importantes para verificar el modelo de capas nuclear y puede usarse en un futuro como punto de partida para futuros cálculos de la estructura nuclear hacia la línea de goteo neutrónica. Por otro lado, dicha región es relevante para la astrofísica nuclear, especialmente para la realización de cálculos de nucleosíntesis.

Los núcleos exóticos fueron producidos en el laboratorio RIKEN (Japón) mediante la fisión de un haz primario de ^{238}U a 345 MeV/u sobre un blanco de Be. Los núcleos fueron separados e identificados, suceso a suceso con el separador de fragmentos BigRIPS y parados en el stopper activo WASABI. La figura muestra la identificación de los núcleos producidos en el experimento. Los núcleos de más alto interés son ^{132}Cd y $^{136/138}\text{Sn}$. WASABI, que consiste en 8 detectores segmentados de Si (cada uno de ellos con una dimensión de $60 \times 40 \text{ mm}^2$ y segmentado en $60+40$ bandas), está rodeado por 12 detectores de germanio provenientes de EUROBALL para detectar los rayos gamma emitidos en la desintegración de estados isoméricos así que después de la desintegración beta de los núcleos exóticos. Los datos de este experimento, que se ha realizado en diciembre de 2012, están siendo analizados por J. Taprogge en el marco de su tesis doctoral.



Gráfica de identificación de los núcleos producidos en el experimento RIBF-85. La proporción masa-carga es calculada mediante el tiempo de vuelo a lo largo del separador BigRIPS usando diversos factores de corrección como el de la posición en los diferentes planos focales. La carga nuclear Z de los núcleos es deducida por la pérdida de energía en la cámara de ionización.

EXPERIMENTOS IS524 E IS510: EXCITACIÓN COULOMBIANA DE ISÓTOPOS DE CD Y ZN RICOS EN NEUTRONES EN REX-ISOLDE

FPA2009-13377-C02-02 y FPA2011-29854-C04-01

Con el experimento IS524 continuamos nuestro estudio de los isótopos de Cd ricos en neutrones cerca del cierre de capas $N=82$ usando la excitación Coulombiana a energías bajas. En el pasado, haces radiactivos de isótopos Cd con A par, $^{124,126,128}\text{Cd}$ fueron usados y nos mostraron que dichos núcleos pueden ser más colectivos de lo esperado a base de cálculos modernos con el modelo de capas. Sin embargo cálculos más allá del campo medio si predicen que estos núcleos están débilmente deformados. Estas facetas son sorprendentes teniendo en cuenta la proximidad de estos isótopos al núcleo doblemente mágico ^{132}Sn . Extendimos nuestros estudios de excitación Coulombiana a los núcleos con A impar, los cuales nos pueden dar una visión única del papel que los diferentes orbitales del modelos de capas desempeñan en el desarrollo de deformación en dicha región. En este tipo de estudios, la aparición de colectividad llega a ser especialmente importante en vista de los recientes resultados que muestran que los núcleos de Cd con capas semi-llenas ya no pueden clasificarse como de naturaleza vibracional.

En el experimento IS510 el núcleo ^{72}Zn , 2 protones y 2 neutrones más allá del posible doble mágico ^{68}Ni , ha sido estudiado mediante excitación Coulombiana en cinemática inversa. Los datos actuales sugieren la casi degeneración de los estados 2^+ de 2-fonones y el carácter de mezcla simétrica, respectivamente. La identificación del estado 2^+_{ms} en ^{72}Zn será una medida directa de la interacción entre los protones y los neutrones de valencia los cuales son la clave para la comprensión de la naturaleza de ^{68}Ni . Este experimento se espera que proporcione información complementaria a nuestra medición reciente del factor g en ^{72}Zn (véase más arriba).

EXPERIMENTOS S428, S428 Y S433: EXCITACIÓN COULOMBIANA A ENERGÍAS RELATIVISTAS DENTRO DE LA CAMPAÑA PRESPEC EN GSI

FPA2009-13377-C02-02 y FPA2011-29854-C04-01

La campaña PRESPEC en GSI es la precursora del proyecto HISPEC en la futura instalación FAIR. En PRESPEC, la primera etapa de la matriz de seguimiento de radiación gamma europea AGATA (alrededor de veinte 36-pliegues segmentados de cristales de Germanio) fue utilizada en combinación con el separador de fragmentos FRS y el detector de matriz partículas cargadas LYCCA-0 para realizar espectroscopia en-haz a energías relativistas, utilizando principalmente excitaciones Coulombianas y reacciones “knockout” para poblar los estados de interés en los núcleos atómicos exóticos producidos en la fisión o la fragmentación de un haz primario. Hemos estado colaborando en la primera serie de experimentos en 2012 dedicados al estudio de algunos isótopos de Zr, Nb, Mo, Os, Pt y Hg ricos en neutrones. Además, un estudio muy complicado del ^{52}Fe deficiente en neutrones ha sido realizado intentando la excitación Coulombiana del ion de Fe en el estado isomérico 12^+ con vida corta, a fin de obtener información sobre la estructura de este núcleo a alto momento angular por encima del estado isomérico conocido.

EXPERIMENTOS NP1106-RIBF74 Y NP0811-RIBF70R1: ESPECTROSCOPIA GAMMA EN HAZ CON EL ESPECTRÓMETRO DALI2 EN RIKEN

FPA2009-13377-C02-02 and FPA2011-29854-C04-01

Los experimentos NP1106-RIBF74 y NP0811-RIBF70R1 han sido realizados con el fin de estudiar el núcleo semi-mágico ^{104}Sn deficiente en neutrones con sólo 4 neutrones de valencia con respecto al núcleo doblemente mágico ^{100}Sn . Con anterioridad a este experimento, se encontró que la evolución de la probabilidad de transición reducida desde el estado fundamental al primer excitado el estado 2^+ dentro de la cadena de los isótopos de Sn deficientes de neutrones muestra un exceso inesperado hacia el cierre de capas $N = 50$. Con el fin de comprender los mecanismos subyacentes de dicho exceso, se realizó una medición de la excitación Coulombiana a energías intermedias usando el espectrómetro DALI2 y un haz de ^{104}Sn proporcionado por el espectrómetro BigRIPS. En el mismo experimento,

un segundo isótopo del Sn del cual es sabido su probabilidad de transición, a saber, el isótopo estable ^{112}Sn , también fue estudiado, con el fin de extraer las contribuciones de las excitaciones nucleares en la medida de la probabilidad de transición absoluta.

**EXPERIMENTOS NP1112-RIBF83, NP0702-RIBF10, RIBF60&62R1 Y NP1112-RIBF85:
ESPECTROCOPIA DE DESINTEGRACIÓN DENTRO DEL PROYECTO EURICA EN RIKEN
FPA2009-13377-C02-02 and FPA2011-29854-C04-01**

El año pasado el proyecto EURICA (Euroball-RIKEN Cluster Array) empezó a funcionar en la instalación de haces radiactivos (Radioactive Beam Factory (RIBF)) en RIKEN (Japón). Dentro de este proyecto doce detectores compuestos de Ge, los cuales previamente habían sido utilizados por la comunidad europea de estructura nuclear (incluyendo el grupo del IEM) tanto como parte del espectrómetro gamma en 4π EUROBALL así como posteriormente en el proyecto RISING en el GSI, han sido enviados a e instalados en la instalación RIBF en RIKEN.

La idea subyacente es tomar ventaja de la producción incomparable de haces radiactivos exóticos, proporcionados por el complejo acelerador en RIKEN combinadas con el separador fragmentos BigRIPS, para llevar a cabo la espectroscopia de desintegración (tanto de estados isoméricos como la desintegración beta) en las regiones de la tabla de nucleídos que nunca han estado accesibles a este tipo de estudios con anterioridad. Hemos contribuido activamente a la instalación y configuración, así como participado en la primera campaña experimental dedicado al estudio de los isótopos ricos en neutrones en las regiones alrededor de los núcleos doblemente mágicos ^{78}Ni , ^{100}Sn y ^{132}Sn . El experimento NP1112-IBF85, que fue dirigido por nuestro grupo, junto con colegas del LPSC Grenoble (Francia), se describe con más detalle a continuación. Servirá como base del trabajo de doctorado de J. Taprogge.

COMPORTAMIENTO FÍSICO A NANO-ESCALAS

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

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

Durante 2012 nos hemos concentrado en la modelización numérica de algunos de estos procesos microscópicos de adsorción así como en el estudio experimental de la intercalación de moléculas simples (propanol, anilina, etc.) en óxido de grafito. Desde el punto de vista práctico, la idea aquí es la posibilidad de “sintonizar” de forma sencilla el espaciado y la tortuosidad de los nanomateriales sintetizados.

Hemos completado también durante 2012, el estudio experimental del hidrógeno molecular cristalino mediante una combinación de técnicas de dispersión de neutrones y de simulaciones numéricas. La naturaleza cuántica de este cristal se revela en su máxima expresión en estos estudios en los que se demuestra como la deslocalización cuántica fuerza al cristal a permanecer completamente expandido (al borde de la fusión) independientemente de la temperatura (ver Physical Review B 85, 014026 (2012)).

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) si no en áreas tan diversas como la Física de Partículas, el estudio de

materiales para Fusión Nuclear, la producción de isótopos inestables para estudios en Física Nuclear o las posibles aplicaciones de aceleradores de este tipo en radioterapia oncológica. Tres serían los objetivos principales del centro de aceleradores:

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

Durante 2012 las actividades ya desarrolladas así como las planeadas en ESS-Bilbao fueron sometidas a revisión por un comité científico internacional oficial recibiendo excelentes valoraciones. Así mismo cabría destacar que durante 2012 se han concretado las diferentes posibilidades de diseño de blanco de la instalación. Los resultados han superado con creces las expectativas de las especificaciones iniciales. En este sentido cabe también destacar que desde 2011 se entró en una nueva fase en la colaboración que se mantiene con ESS-Lund para el diseño final del blanco de la futura fuente de neutrones europea.

ESPECTROSCOPIA DE RUPTURA DIELECTRICA EN PLASMAS INDUCIDOS POR LÁSER

Se realizó una revisión de los fundamentos de LIBS y de diversos estudios experimentales en gases, tales como He, GeH₄ y CO₂, obtenidos en nuestro laboratorio, para su publicación como un capítulo de un libro. Se revisaron los diferentes procesos físicos que gobiernan la ruptura dieléctrica en gases. Se midieron experimentalmente parámetros como el umbral de ruptura o la temperatura de excitación. A partir del ensanchamiento Stark de diversas emisiones iónicas se obtuvo la densidad electrónica. A partir de las gráficas de tiempo de vuelo se obtuvieron las distribuciones de velocidad y de energía cinética. La densidad electrónica y su evolución temporal se utilizaron para la determinación de las constantes de recombinación electrón-ion a tres cuerpos.

ESPECTROSCOPIA EN PLASMAS DE ABLACION INDUCIDOS POR RADIACION LÁSER INFRARROJA

Se ha estudiado mediante Espectroscopía Óptica de Emisión (OES) los plasmas de ablación de las bases Guanina y Adenina del ADN utilizando un láser pulsado de CO₂ de alta potencia. El análisis del espectro, obtenido con un espectrómetro de alta resolución en condiciones de un vacío medio (4Pa), muestra que las emisiones más intensas corresponden a bandas moleculares de CN ($B^2\Sigma^+-X^2\Sigma^+$), hidrógeno atómico excitado y las especies ionizadas N^+ y C^+ . Las emisiones de intensidad media son debidas a las especies excitadas C^{2+} , C^{3+} , N, O, O^+ y a diversos sistemas moleculares: $C_2(d^3\Pi_g-a^3\Pi_u; D^1\Sigma_u^+-X^1\Sigma_g^+)$, $OH(A^2\Sigma^+-X^2\Pi)$, $NH(A^3\Pi-X^3\Sigma^-)$, $CH(A^2\Delta-X^2\Pi)$, $N_2^+(B^2\Sigma_u^+-X^2\Sigma_g^+)$ y $N_2(C^3\Pi_u-B^3\Pi_g)$. El estudio de la evolución temporal de las diferentes especies atómicas, iónicas y moleculares nos permiten obtener diagramas de tiempo de vuelo óptico a partir de los cuales se pueden obtener las distribuciones de velocidad de distintas especies. A partir de las intensidades y el ensanchamiento Stark de algunas líneas del C^+ , se determinó la temperatura y la densidad electrónica, respectivamente. Se midieron también los umbrales de ablación para la Adenina y la Guanina.

Hemos aplicado la espectroscopía LIBS para el estudio de los plasmas inducido en la ablación IR de los óxidos de Titanio TiO y TiO₂ (en fase Anatasa). El plasma formado en la ablación resultó fuertemente ionizado con distintas especies: Ti^+ , O^+ , Ti^{2+} , O^{2+} , Ti^{3+} y Ti^{4+} y rico en especies atómicas neutras excitadas como Titanio y Oxígeno. La espectroscopía con resolución temporal se aplicó para representar los tiempos de vuelo óptico, de los que se dedujo los tiempos de decaimiento y la distribución de velocidades para diversas especies. Se determinó la evolución temporal de densidad electrónica y la temperatura de excitación. La irradiación de la superficie de TiO₂-anatasa con un láser de CO₂ induce la transformación polimórfica de la anatasa a la fase rutilo del TiO₂. Se utilizó la espectroscopía micro-Raman para estudiar la dependencia de esta transformación con la fluencia y el número de pulsos. Se encontró un efecto de incubación, resultando transformaciones similares con 10 pulsos de energía justo por encima del umbral que con un solo pulso de energía 40 veces mayor que dicho umbral.

Se ha colaborado con la Dra. S. Martínez, del grupo Espectroscopías de Superficie y Fotónica de Plasmones Superficiales de este Departamento, en la obtención de vidrios sintéticos con tecnologías láser tal como se indica en otro párrafo de esta Memoria.

Estos trabajos se han realizado en colaboración con los Profesores J.J. Camacho y J.M. Poyato (Departamento de Química Física de la UAM), M. Sanz y M. Castillejo (IQFR) y la colaboración de la Dra. Věra Jandová (Institute Chemical Processes Fundamentals of Czech Republic).

NANOFABRICACION

Se ha continuado la fabricación de nanopartículas (NPs) metálicas con propiedades plasmónicas avanzadas con vistas a sus aplicaciones espectroscópicas. El principal objetivo de esta nanofabricación ha sido la obtención de sistemas nanoscópicos con alta intensificación del campo electromagnético. La estrategia seguida para la obtención de estos sistemas ha sido: a) La preparación de NPs anisotrópicas con morfologías especiales que den lugar a una gran intensificación de campo, como nanoprismas triangulares y nanoestrellas; y b) la asociación de nanopartículas esféricas mediante el uso de moléculas bifuncionales que dan lugar a la formación de cavidades interpartícula altamente eficaces en la intensificación de la dispersión Raman (hot spots). Durante el año 2012, se ha avanzado de manera muy especial en la obtención de protocolos de preparación de nanoestrellas de plata, nanopartículas éstas que no habían sido preparadas hasta la fecha. Estas nanopartículas presentan un mayor número de ventajas respecto a las de oro, como la mayor eficacia SERS (mayores factores de intensificación) y el mayor intervalo de actividad, ya que las NPs de Ag presentan resonancias de plasmón en todo el espectro visible y en la zona del infrarrojo cercano. Además, se han ensayado protocolos de obtención que evitan el empleo de sustancias surfactantes, como las normalmente usadas en la preparación de nanoestrellas de Au, ya que estas sustancias evitan el acercamiento a la superficie del analito a estudiar disminuyendo así la eficacia de estos sistemas en espectroscopía. Por otra parte, el ensamblaje de NPs se ha llevado a cabo empleando como moléculas bifuncionales diaminas, ditioles (tanto alifáticos como aromáticos) y disocianuros aromáticos con cadena intermedia fenilénica de longitud variable. La caracterización de estos sistemas se ha llevado a cabo mediante resonancia de plasmones, TEM y Espectroscopía SERS y SEF.

FUNCIONALIZACIÓN DE SUPERFICIES: FABRICACIÓN DE NANOSENSORES

La funcionalización de las superficies metálicas obtenidas mediante autoensamblaje de moléculas orgánicas ha constituido también una línea importante en nuestro grupo durante 2012. La funcionalización permite aumentar de manera considerable la sensibilidad y la selectividad de las nanoestructuras fabricadas, dando lugar a superficies de altas prestaciones, al combinar las propiedades físicas de los sistemas metálicos obtenidos e inmovilizados, con las propiedades químicas de las moléculas orgánicas autoensambladas sobre ellos. Además, estas moléculas pueden permitir que las NPs sean biocompatibles, lo que presenta gran interés en aplicaciones médicas, y permiten controlar el acoplamiento de estos sistemas.

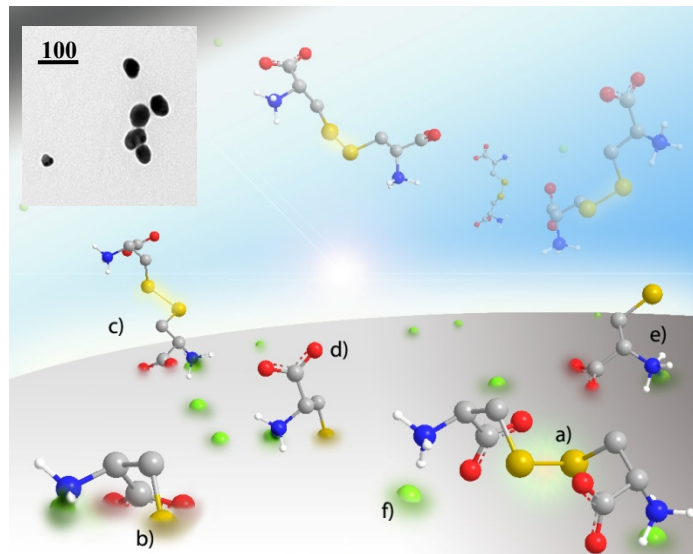
La funcionalización de NPs con ciclodextrinas modificadas con ditiocarbamato (DTC) ha sido completada con éxito durante este año. Estos sistemas han permitido la detección de dopantes del deporte, en concreto la nandrolona, hasta concentraciones micromolares. Estos resultados han dado lugar a una patente que se encuentra en estado de solicitud. Otras moléculas funcionalizadoras que se han empleado recientemente y que funcionan como moléculas ensambladoras de inclusión son los cucurbituriles. Estos ensambladores moleculares presentan también, al igual que las ciclodextrinas, una cavidad hidrofóbica interna dentro de la cual pueden alojarse moléculas difíciles de detectar por SERS. La capacidad donadora de electrones de estos compuestos ha permitido su uso para la detección de pesticidas viológenos y el estudio de su dimerización dentro de la cavidad de los mismos.

Otros experimentos de funcionalización de NPs han consistido en el empleo de ditioles alifáticos. Estas moléculas bifuncionales desempeñan una doble función: a) el acoplamiento de nanopartículas con la formación de espacios interpartícula de gran intensificación de campo, y b) la creación de cavidades intermoleculares que permiten el ensamblaje de analitos. La detección de analitos es entonces posible ya que se concentran en las cavidades interpartícula donde la intensificación del campo es máxima. Mediante este método se ha llevado a cabo la detección de pesticidas organoclorados como el endosulfán, la aldrina y el lindano. Estos trabajos se han realizado en el marco de la colaboración que nuestro grupo mantiene con investigadores de la Universidad P.J. Safarik de Kosice (Eslovaquia).

Durante este último año se ha iniciado una nueva línea de investigación en la que se pretende realizar la funcionalización de NPs con diisocianuros y moléculas relacionadas, con el fin de aplicar estos sistemas en procesos catalíticos de interés industrial. Esta línea se está desarrollando en colaboración con investigadores de la Universidad de Hokkaido en Sapporo (Japón).

INTERACCIÓN BIOMOLÉCULA/NANOPARTÍCULA PLASMÓNICA

Durante el año 2012 se ha estudiado en profundidad la interacción de determinadas moléculas biológicas con nanopartículas metálicas de Ag y Au. Este estudio se ha dirigido también en parte hacia la funcionalización de NPs con biomoléculas con el fin de conferirles una mayor biocompatibilidad. Gran parte de estas investigaciones se han



Adsorción y estabilidad de cistina adsorbida sobre nanopartículas metálicas plasmónicas (micrografía TEM insertada) deducida del análisis de los espectros SERS.

realizado en colaboración con investigadores de la Universidad de Paris XIII (Francia). Concretamente se ha llevado a cabo un estudio de interacción de aminoácidos sulfurados (cisteína y cistina), en el que se ha seguido la estabilidad del enlace S-S en presencia de superficies de Ag y Au. Asimismo, y también dentro de esta colaboración, se ha iniciado el estudio de péptidos de interés farmacológico sobre NPs plasmónicas, como la somatostatina, con fines analíticos.

Otro péptido de gran interés médico que se ha estudiado es este año es el β -amiloide, el cual está relacionado con el desarrollo de la enfermedad de Alzheimer. En este sentido, se ha llevado a cabo la caracterización vibracional del colorante tioflavina mediante espectroscopia SERS y SEF. Este colorante es capaz de interactuar con proteínas amiloideas permitiendo la detección del β -amiloide y péptidos relacionados en pequeñas cantidades, lo que permitiría la detección precoz de esta enfermedad.

Dentro de esta misma línea de investigación, se ha seguido con el estudio de la adsorción de proteínas (albúmina humana y bovina, así como la mioglobina, importante proteína relacionada con el transporte y almacenamiento de oxígeno en músculo) sobre metales. Este trabajo se ha realizado en colaboración con investigadores de la Universidad de Florencia (Italia).

Se ha continuado con el análisis estructural de materiales biológicos altamente fluorescentes de difícil caracterización mediante técnicas espectroscópicas convencionales. En este terreno se ha realizado un estudio estructural y dinámico de sustancias polifenólicas procedentes de las sustancias húmicas y melaninas resultantes de procesos de digestión inducidos por hongos. En particular, se ha llevado a cabo una caracterización SERS/SEF de sustancias húmicas de distinto origen (suelo, leonardita, lignito) sobre NPs de diferente morfología, poniéndose en práctica estrategias de aumento de la intensificación Raman y de fluorescencia en presencia de los soportes metálicos. En este sentido, se ha llevado a cabo la funcionalización de las superficies con diaminas alifáticas con el fin de aumentar la señal procedente de estos sistemas moleculares de alta complejidad. Estos trabajos se han realizado en colaboración con investigadores de la Universidad de Bolonia (Italia).

En colaboración con el Departamento de Biofísica de la Universidad P.J. Safarik de Kosice en Eslovaquia, se ha completado el estudio la caracterización estructural mediante la técnica SERS de sustancias naturales antraquinónicas con posibles propiedades antitumorales. Este estudio se ha centrado en el pigmento parietina, presente en los líquenes de la especie *Xanthoria parietina*. Asimismo, también se ha realizado un análisis de la distribución del pigmento en las hojas de estos líquenes mediante la técnica de imagen Raman.

Por otro lado y junto con el Prof. Alessandro Feis, de la Universidad de Florencia (Italia), se ha realizado un estudio de la cinética de desnaturalización de la proteína mioglobina en el proceso de absorción sobre la superficie de nanopartículas de oro y de la agregación de las mismas. Estos procesos que ocurren simultáneamente y son dependientes de la concentración de la proteína y del pH del medio, hacen que su conocimiento sea esencial para comprender las condiciones en la que se produce el espectro SERS de una proteína.

FLUORESCENCIA DE FARMACOS INTENSIFICADA POR SUPERFICIES METÁLICAS

Se ha usado la técnica SEF (Surfaced-enhanced-fluorescence), para caracterizar sistemas nanotransportadores de fármacos sencillos que están compuestos por nanopartículas de plata con el medicamento adsorbido y de fármacos multi-etapa compuestos por nanopartículas de plata con el fármaco infiltradas en silicio poroso. Los fármacos

utilizados en el estudio han sido los anti-inflamatorios no esteroideos ketorolaco, indometacina y piroxicam y el antitumoral emodina.

En el caso de los anti-inflamatorios no esteroideos, se han usado conjuntamente los resultados de SEF y SERS para caracterizar la unión a la superficie de las nanopartículas de las moléculas a diferentes pHs, simulando condiciones similares a las de estudios *in vivo*. Para el antitumoral emodina, y continuando los estudios comenzados en años anteriores, se ha estudiado el SEF del fármaco adsorbido sobre nanopartículas de plata e infiltrado en silicio poroso. Se han obtenido resultados para diferentes tipos de coloides y métodos de infiltración. Así mismo, también se ha estudiado la influencia de la presencia de proteínas de plasma en las muestras. Se han obtenido las mejores condiciones para una mayor amplificación de la señal de fluorescencia. También se han realizado estudios de liberación de los fármacos previamente adsorbidos a nanopartículas metálicas y su competitividad con la unión a la albúmina del plasma.

NANOSENSORES SERS APLICADOS EN LA DETECCIÓN DE FÁRMACOS EMPLEADOS EN DOPAJE DEPORTIVO

Durante este año se han obtenido interesantes resultados en la aplicación de la técnica SERS a la caracterización y detección de fármacos empleados en dopaje deportivo. Estos estudios se han centrado en el fármaco aminoglutetimida (AGI), inhibidor de aromataasa empleado en deportistas para evitar la pérdida de masa muscular y el probenecid (PB), agente empleado para ocultar el empleo de otros agentes anabólicos. Se ha desarrollado un método para la detección de estas sustancias basado en el empleo de nanopartículas con forma de prisma trigonal. Este estudio ha permitido obtener rectas de calibración, a partir de las cuales es posible deducir importantes parámetros estructurales de estas moléculas, como la constante de adsorción, el límite de detección, el coeficiente de intensificación SERS y la señal máxima medible por espectroscopía SERS.

También se ha detectado el dopante nandrolona mediante el uso de ciclodextrinas funcionalizadas con grupos ditiocarbamato. Todos estos resultados forman parte de la tesis doctoral de Irene Izquierdo Lorenzo, que fue defendida en julio de 2012.

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

Dentro de esta línea de investigación se ha continuado con la aplicación de las espectroscopías SERS y SEF al estudio de pigmentos orgánicos sintéticos de altas prestaciones, lo que constituyó la tesis doctoral de Elena del Puerto, defendida en mayo de 2012. Los pigmentos investigados en este estudio han sido fundamentalmente derivados de la quinacridona. Estos compuestos son altamente refractarios y durables debido, entre otras cosas, a su alta insolubilidad en medio acuoso, lo que dificulta notablemente su caracterización mediante técnicas espectroscópicas. Se ha continuado con el estudio de las condiciones óptimas para llevar a cabo la dispersión de estas moléculas. Durante este año se han ensayado métodos alternativos de dispersión de estas sustancias basados en el empleo de líquidos iónicos (Nitrito de Tetrabutilamonio y cloruro de 1,3-butilmetilimidazolio) que han permitido la dispersión de las quinacridonas y su adsorción sobre superficies metálicas en electrodos para su detección mediante SERS.

Se ha continuado con la aplicación de la espectroscopía Raman y la técnica SERS en el estudio de pigmentos contenidos en manuscritos islámicos antiguos procedentes de Marruecos. El empleo de nanopartículas de Ag aplicadas sobre determinadas zonas coloreadas de los manuscritos estudiados y el uso del Raman confocal, que permite un aumento de la resolución espacial de las medidas, ha puesto de manifiesto la presencia de pigmentos de naturaleza antraquinónica en dichos manuscritos. De los espectros SERS obtenidos, se ha podido identificar la presencia de carmín en tintas de coloración rojo rosado y también en tintas negras con matices rojizos. Este trabajo se ha realizado gracias a un convenio bilateral de colaboración CSIC-CNRST con investigadores de la Universidad Moulay Ismail de Meknes en Marruecos.

Se ha continuado con la caracterización de aditivos moleculares orgánicos tradicionales y comerciales utilizados en materiales de construcción de interés para el Patrimonio Histórico. Con respecto a los aditivos comerciales, son compuestos orgánicos fuertemente fluorescentes que se añaden en pequeña proporción a la pasta de cemento, lo que hace necesario el empleo de la técnica SERS para su detección en muestras de cemento. Durante este año, se ha llevado a cabo el estudio SERS de un aditivo superplastificante de tercera generación. El principal objetivo es la determinación de las condiciones experimentales (concentración, pH, láser de excitación y tipo de nanopartículas metálicas) óptimas para la detección del superplastificante mediante la técnica SERS.

En colaboración con el Departamento de Construcciones Arquitectónicas (Universidad Politécnica de Cataluña) se ha estudiado la carbonatación de sistemas cementantes ternarios y mediante la aplicación de técnicas

espectroscópicas Raman se ha podido identificar la formación de un carbonato sulfato de calcio hidratado que es amorfo.

Uno de los materiales de construcción utilizados en la construcción de edificios del Patrimonio son los morteros de naturaleza puzolánica. En dichos materiales se forman fases metaestables cuya formación no está muy clara. En colaboración con el Instituto de Ciencias de la Construcción Eduardo Torroja del CSIC, se ha estudiado la reacción de conversión, a largas edades, de dichas fases metaestables, mediante la aplicación de técnicas espectroscópicas. Se ha observado que a 34 y 123 días predomina la fase estable cúbica (hidrogranate) frente a la fase metaestable hexagonal; lo que puede ser una primera evidencia de la posible reacción de conversión.

El objetivo principal de la tesis doctoral de Isabel Sáez fue incrementar el conocimiento sobre la nanoestructura del gel C-S-H. En particular se estudió el efecto de la composición de las fases anhidras, la temperatura y la presencia de nanosílice. Uno de los resultados más importantes ha sido determinar que la nanosílice favorece la formación de geles C-S-H con bajas relaciones Ca/Si y retarda la formación de estructuras tipo jenita a 25° y 40°C mientras que a temperaturas de 65°C son las estructuras tipo tobermorita las más favorecidas. Los estudios estructurales se han realizado utilizando fundamentalmente técnicas espectroscópicas.

Se ha utilizado el Raman portátil en la detección de tratamientos de conservación (copolímero de etilmetacrilato y ortosilicato de etilo) después de aplicarlos en piedras calizas, en cooperación con el Instituto de Geociencias del CSIC.

Finalmente, se está trabajando, en colaboración con el grupo de Espectroscopía de Plasmas de Ablación y Fotodisociación de este Departamento, en la obtención de vidrios sintéticos en materiales del Patrimonio de base silicio mediante la utilización de Láseres continuos y pulsados y su posterior identificación mediante técnicas espectroscópicas, ablación láser (LIBS), espectroscopía Raman e Imaging. Los resultados obtenidos muestran que irradiando con láseres continuos de CO₂ se generan vidrios y que las elevadas temperaturas que se alcanzan en todos los casos (4000-5000K), llevan asociados cambios en la microestructura de dichos vidrios.

ESTUDIO POR ESPECTROSCOPIA SERS DE LA ADSORCIÓN DE INSECTICIDAS NEONICOTINOIDES

Se ha llevado a cabo el estudio vibracional del insecticida thiacloprid por espectroscopía SERS. Se determinaron las condiciones óptimas de detección de este insecticida en diferentes condiciones experimentales (longitud de onda de excitación, nanopartículas metálicas y concentración del analito). En primer lugar se llevó a cabo la caracterización estructural de la molécula con ayuda de técnicas de química computacional. Se estudió la estructura de cuatro posibles conformeros del thiacloprid. Se estudiaron las diferentes geometrías que adopta la molécula sobre la superficie en función de las distintas condiciones empleadas. Este trabajo se llevó a cabo en colaboración con el Prof. Alessandro Feis, de la Universidad de Florencia.

DISEÑO DE UN DISPOSITIVO DE MICROFLUÍDICA PARA ESPECTROSCOPIA SERS

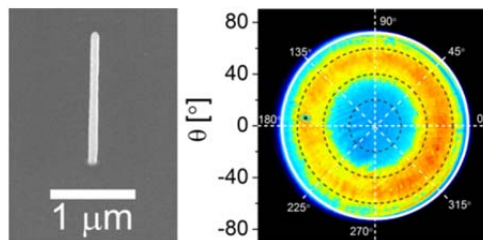
Se ha comenzado a trabajar en el diseño de un dispositivo para el estudio SERS de moléculas en un sistema de flujo en volúmenes del orden de los microlitros. En primer lugar se ha diseñado un dispositivo adaptable al microscopio Raman con objeto de realizar medidas SERS en un tubo capilar de un milímetro de diámetro. En concreto, se han registrado en estático espectros SERS intensos a lo largo del diámetro del capilar con una molécula patrón. Estas medidas se han realizado llevado a cabo con un microscopio óptico dotado de un objetivo de largo alcance y un sistema de registro de espectros a distintas profundidades.

Las siguientes actividades de investigación relacionadas principalmente con la parte teórica del grupo de Espectroscopías Ópticas en Nanoestructuras metálicas, se han llevado a cabo, bajo los auspicios de los proyectos: NANOPLAS ÓPTICA nanoantenas plasmónicas (FIS2009-11264) y del proyecto CONSOLIDER-INGENIO Emet: metamateriales Ingeniería (CSD2008-00066):

- **Propiedades ópticas de nanoestrellas y nanohilos metálicos:** Hemos investigado teóricamente las propiedades ópticas asociadas a la excitación de plasmones de superficie localizados (LSP) en nanopartículas de Au y Ag de diversas formas. Por un lado, se han estudiado nanoestrellas de oro como candidatas para calentadores térmicos eficientes gracias a sus intensos LSPs. Los cálculos numéricos se realizaron a través del método del teorema de Green 3D para obtener la absorción y dispersión de las secciones transversales de nanopartículas de oro con forma de estrella de simetría variable y distinto número de puntas (modeladas por una *Supershape*). Sus propiedades termoplasmónicas, únicas, las hacen especialmente adecuadas para el Calentamiento Óptico y a su vez para la *terapia térmica del cáncer* (ver ScienceShot adjunto en Cap. 2B). Además, hemos demostrado, mediante algoritmos genéticos de optimización, que entre una variedad de formas de nanopartículas, las nanoestrellas maximizan las

secciones transversales LSP. Por otro, hemos propuesto dos configuraciones distintas que, explotando la interferencia Fano de LSP longitudinales que se producen en nanohilos metálicos individuales, se pueden emplear en la *detección del índice de refracción*: una suspensión coloidal de nanoesferoides (nanorroz) y un nanocable aislado con sección transversal rectangular (nanocinta) sobre un sustrato dieléctrico.

• **Fotoluminiscencia de nanohilos semiconductores:** Hemos demostrado experimentalmente la emisión direccional de la luz polarizada de nanohilos semiconductores individuales. La direccionalidad de esta emisión ha sido determinada directamente de las medidas de microfotoluminiscencia de Fourier de nanohilos de InP con orientación vertical (ver figura adjunta). Los nanohilos se comportan como nanoantenas ópticas eficientes, con características de emisión determinadas por el material y por su geometría y dimensiones. Por medio de simulaciones de elementos finitos, se muestra que la potencia radiada se puede intensificar para frecuencias y diámetros en los que se excitan modos *leaky*. Estos modos están a su vez asociados a resonancias de Mie en la estructura cilíndrica. La potencia radiada puede ser también inhibida a otras frecuencias o cuando el acoplamiento de la emisión a las resonancias no se ve favorecido. Anticipamos la relevancia de estos resultados para el desarrollo de nanohilos como fuentes de fotones con una eficiencia optimizada y/o emisión controlada por la geometría. Esto se ha realizado en colaboración con el grupo del Dr. Jaime Gómez Rivas FOM-Institute AMOLF (Amsterdam) y Philips Research Labs (Eindhoven).



BIOESPECTROSCOPIA INFRARROJA Y RAMAN

Se ha aplicado la espectroscopía de correlación bidimensional infrarroja y Raman a la búsqueda de nuevos biomarcadores espectroscópicos, para diagnóstico de la enfermedad de Alzheimer, en plasma de sangre periférica. En la región Raman comprendida entre 3100 y 800 cm^{-1} se han detectado nuevos biomarcadores indicativos de la relación lípido/proteína y de la estructura proteica. En la evolución de esta enfermedad se advierte particularmente un enriquecimiento en estructura β -proteica a expensas de α -hélices, así como un aumento de la relación lípido/proteína. Se ha realizado asimismo análisis estadístico multivariante combinando los biomarcadores espectroscópicos Raman e infrarrojos identificados hasta ahora y se han obtenido clasificaciones correctas de muestras en torno al 90% de sensibilidad y especificidad.

ESTRUCTURA DE SISTEMAS BIOLÓGICOS EN ALIMENTOS

En colaboración con el Instituto de Ciencia y Tecnología de Alimentos y Nutrición (ICTAN, CSIC) se ha aplicado la espectroscopía Raman para determinar las estructuras de lípidos y polisacáridos en diversas emulsiones de aceite de oliva en agua con inulina o dextrina incorporada. Aunque estos sistemas presentan estructuras micelares e interacciones lipídicas muy similares, existen enlaces de hidrógeno polisacárido-agua más fuertes en las emulsiones que contienen inulina, lo que puede explicar el hecho de que las propiedades tecnológicas de las emulsiones de inulina sean diferentes de las emulsiones que contienen dextrina.

Asimismo en colaboración con el Instituto de Ciencia y Tecnología de Alimentos y Nutrición (ICTAN, CSIC) se ha continuado con el desarrollo de métodos que puedan utilizarse para establecer condiciones de procesamiento y conservación de pescado congelado así como verificar si el pescado es fresco o ha sido previamente congelado. Los resultados obtenidos con determinados marcadores físico-químicos, incluida la señal de relaxometría RMN de bajo campo, han permitido desarrollar modelos que permiten monitorizar la calidad de merluza congelada y predecir el tiempo y la temperatura de conservación. Estos resultados muestran el gran potencial de la relaxometría RMN de bajo campo y la espectroscopía vibracional para la identificación de pescado fresco y pescado congelado y descongelado. De este modo se proporciona una metodología para controlar el riesgo que supone no congelar el pescado cuando va a consumirse crudo o someterse a tratamientos que no eliminan las larvas de *anisakis* (Reglamentos UE 104/2000 and 2065/2001), y por lo tanto se cubre no sólo un aspecto de calidad y fraude comercial, sino de riesgo sanitario.

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.
- Coeficientes de transferencia de energía rotacional por colisiones moleculares.
- Solidificación molecular en microchorros criogénicos de líquidos.
- Parámetros espectroscópicos de moléculas relevantes en procesos atmosféricos o de combustión.
- Control cuántico molecular.
- Alineamiento y orientación molecular.
- Gases cuánticos ultrafríos.

TÉCNICAS UTILIZADAS:

Espectroscopía de infrarrojo y espectrometría de masas aplicadas a sistemas de baja temperatura y presión.

- Métodos Computacionales: Gaussian, SIESTA, CASTEP .
- Generación de plasmas fríos en descargas de gases a baja presión.
- Espectrometría de masas de iones y neutros con resolución de energía.
- Espectroscopía visible de emisión de plasmas.
- Sondas de Langmuir para medidas de energía electrónica y de densidad de carga.
- Espectroscopía Raman lineal.
- Chorros supersónicos de gases.
- Microchorros de líquidos subenfriados.
- Criogenia.
- Espectroscopía Raman Estimulada.
- Espectroscopía de Doble resonancia Raman-Raman.
- Espectroscopía Infrarroja por Diferencia de Frecuencias.
- Métodos 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 refrigerado por He en circuito cerrado podemos alcanzar hasta unos 6 K, lo que nos permite acceder a un rango de temperaturas muy interesantes en el ámbito astrofísico. En los párrafos siguientes describimos en mayor detalle las contribuciones más relevantes obtenidas durante el año 2012.

Dentro de nuestra línea de investigación con tendencia astrobiológica, y después del estudio de la molécula de glicina descrito en detalle en la Memoria anterior, nos hemos centrado en otro aminoácido, la alanina, detectado en asteroides con una concentración dextro/levo diferente a la existente en nuestro planeta. Utilizando la técnica desarrollada ad hoc para este tipo de muestras, hemos llevado a cabo un estudio espectroscópico de alanina en sus formas neutra e iónica, aislada y en entornos polares y no polares, y hemos analizado cambios en su estructura en un

rango de temperaturas entre 25 y 200 K. En el trabajo publicado, entre otras conclusiones, destacamos la mayor concentración de la forma neutra sobre la iónica que puede esperarse en muestras astronómicas, a bajas temperaturas, con la posible coexistencia de moléculas no-polares, como CH₄ o CO₂.

Observaciones en medios astrofísicos han detectado una banda de absorción a 4.62 μm, atribuida en principio al ion cianato OCN⁻. Al objeto de proporcionar más información sobre estos datos, hemos realizado un estudio espectroscópico de hielos conteniendo cianato y agua en distintas condiciones de temperatura y concentración, con soporte de cálculos teóricos sobre los mismos sistemas. Los resultados muestran que dicha banda puede sufrir importantes alteraciones en frecuencia e intensidad dependiendo del medio en que se encuentre la muestra. Por otra parte, hemos observado que el cianato en disolución reacciona espontáneamente, en ciertas condiciones, generando el ion bicarbonato, HCO₃⁻, cuya observación en medios astrofísicos está todavía pendiente de confirmación. Hemos propuesto una zona espectral óptima para la detección de este ion en función de las características del medio astrofísico de observación. Estos resultados se han plasmado en un artículo publicado y otro recientemente aceptado. Otra de las publicaciones obtenidas este año recoge el estudio cuantitativo del grado de porosidad y de la cinética de cristalización de hielos de agua generados mediante técnicas distintas. Los hielos caracterizados son candidatos a estar presentes en objetos astrofísicos, y las propiedades estudiadas son clave en los procesos químicos y físicos que tienen lugar en ellos. Hemos obtenido también nuevos resultados sobre el sistema CO₂/H₂O, en colaboración con el grupo de Guillermo Muñoz Caro, en el CAB. Los resultados se han enviado a publicar y se describirán con más detalle próximamente.

Algunos de nuestros resultados se han recogido también en un artículo de revisión acerca de hielos y sus múltiples características tanto en medios geofísicos terrestres como en otros objetos del sistema solar.

En la parte atmosférica, se ha realizado un exhaustivo estudio teórico sobre las propiedades termodinámicas de los óxidos de yodo. Estos compuestos son de gran interés en la tropósfera ya que intervienen en las reacciones de destrucción de ozono y además dan lugar a la producción de partículas ultra-finas que finalmente generan aerosoles marinos. Esta investigación ha sido realizada en colaboración con la Universidad de Leeds, y los resultados están todavía pendientes de publicación.

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

Se ha investigado la cinética de plasmas de H₂ + N₂ iniciada el año anterior, estudiando ahora distintas proporciones (1-10%) de N₂ con presión total de mezcla (8 Pa) suficiente para favorecer las reacciones de protonación por colisiones en fase gas y la formación preferente del NH₄⁺ como ion predominante, cosa que ocurre incluso a concentraciones mínimas de NH₃. El interés de este estudio radica en sus posibles implicaciones astrofísicas, pues el ion NH₄⁺ está predicho como especie relativamente abundante en determinadas regiones interestelares donde el amoníaco puede estar desorbido de los granos de polvo, pero este ion aún no ha sido detectado en el espacio. Como se demostró anteriormente, en la química de neutros de nuestros plasmas domina la formación heterogénea de NH₃, mientras la distribución de iones es producto de la competencia entre ionización directa por impacto electrónico, que depende de la temperatura electrónica, y reacciones ion-molécula.

También se han realizado estudios cinéticos con resolución temporal en descargas de H₂ + N₂ y se han comparado las medidas experimentales con las predicciones del modelo elaborado con anterioridad, encontrándose un acuerdo satisfactorio.

Se han empezado a estudiar descargas de H₂ + O₂ para observar la formación de H₂O en las superficies del reactor y la aparición de iones protonados (H₃⁺, H₃O⁺, HO₂⁺), y se está elaborando un modelo cinético para interpretar los resultados. Así mismo, se han estudiado mezclas de H₂ + N₂ + O₂ donde la abundancia relativa de los diferentes iones protonados se explica por la afinidad protónica de sus moléculas precursoras.

Se han estudiado, en descargas de H₂, las emisiones atómicas y moleculares del plasma con espectroscopía visible de alta resolución (<0.01 nm). Ello ha permitido observar tres tipos de ensanchamientos en las líneas de la serie de Balmer del H, que se explican por los rangos de energía cinética de los átomos, muy diferentes entre sí. También, se ha determinado la temperatura rotacional y vibracional del H₂. Se ha encontrado que existe un gran alejamiento del equilibrio termodinámico, ya que los distintos grupos de partículas presentan energías que difieren hasta en cinco órdenes de magnitud. La medida de las energías de los iones por espectrometría de masas, aplicando un modelo sencillo, permite confirmar el origen de los átomos de hidrógeno más energéticos como causados por procesos de transferencia de carga.

Dinámica y cinética de reacciones químicas

Se ha completado y publicado el estudio de la dinámica de las reacciones de intercambio de protón (o deuterón) $D^+ + H_2$ y $H^+ + D_2$, con especial énfasis en la simulación del conjunto de medidas de secciones eficaces y coeficientes cinéticos acumulados desde los ochenta para estos sistemas. Para este estudio se han aplicado tres enfoques teóricos: Cálculos mecanocuánticos, QM, cálculos de trayectorias quasiclásicas, QCT, y un modelo quasiclásico estadístico, SQCT. Para las dos reacciones estudiadas, el mejor acuerdo global con el experimento se obtiene con el método QCT. Los cálculos QM también funcionan bien, aunque algo peor que los clásicos. Los peores resultados corresponden al modelo SQCT, que solo es adecuado para bajas energías. Los resultados de la comparación indican también que las medidas experimentales más fiables son las medidas mediante el método de “haces unidos” (merged beams). Ninguno de los métodos teóricos reproduce satisfactoriamente los coeficientes cinéticos experimentales para el sistema $H^+ + D_2$ a energías de colisión menores de 0.2 eV donde la reacción es relevante para entornos astrofísicos.

Se ha llevado a cabo también un estudio de la dinámica de las reacciones $Mu + H_2(v=0,1)$ y $D + H_2(v=0,1)$ utilizando cálculos QM y QCT. La comparación de los resultados de los cálculos QCT y QM con las medidas experimentales ha confirmado las expectativas iniciales de un gran efecto túnel para la reacción $Mu + H_2(v=1)$ que es ligeramente exoérgica. Se trata probablemente de la manifestación más clara de este efecto en una reacción química. A pesar de la ligereza del muonio (Mu), un átomo formado por un muón positivo y un electrón, el efecto túnel no es visible en la reacción endoérgica $Mu + H_2(v=0)$ debido a la gran energía de punto cero asociada con la formación de MuH. Un análisis detallado muestra que el efecto túnel en $Mu + H_2(v=1)$ se debe básicamente a una ruptura de la adiabaticidad vibracional ($v=1 \rightarrow v=0$) a lo largo del camino de reacción.

FLUIDODINAMICA MOLECULAR

Se ha continuado con el estudio de los flujos de fluidos en la interfase entre la descripción microscópica, esencialmente molecular y cuántica, y la macroscópica, regida por la mecánica de fluidos en el régimen del continuo. Si bien ambas vertientes están bien desarrolladas como campos independientes, su conexión es una tierra de nadie con acusado déficit de datos experimentales, de modelos teóricos suficientemente rigurosos, y de métodos de cálculo eficientes. Desde el punto de vista experimental, los chorros de líquidos subenfriados son un medio ideal para estudiar la solidificación homogénea, libre de los efectos de las paredes de recipientes y de impurezas. Por su parte, los chorros supersónicos de gases son un medio extraordinariamente fértil, en el que es viable el estudio de las colisiones moleculares inelásticas, el mecanismo fundamental de transferencia de energía en gases.

El Laboratorio de Fluidodinámica Molecular dispone de dos instalaciones de diagnóstico de chorros mediante espectroscopía Raman, únicas en su género por sus prestaciones y flexibilidad, desarrolladas a lo largo de los últimos diecinueve años. Una (A) está dedicada al estudio de microchorros de líquidos, y la otra (B), a colisiones inelásticas. Entre las mejoras realizadas a lo largo de 2012 destacan la adquisición de un microscopio portátil para poder inspeccionar las toberas “in situ”, y una plataforma de microposicionamiento para reemplazar al mecanismo de barrido del espectrógrafo del instrumento (B).

En la instalación (A) se han generado, en colaboración con la Universidad de Frankfurt (Alemania), microchorros líquidos (filamentos) de mezclas de *para*- H_2 con *orto*- D_2 (al 1%, 5% y 10%,) y Ne (0,3%, 1% y 2%), y de *o* D_2 con *p* H_2 (2% y 5%) y Ne (1%, 2% y 5%). Estos filamentos, de 5 micras de diámetro, se enfrían en vacío por evaporación superficial, obteniéndose líquido altamente subenfriado por debajo del punto de fusión, hasta que se rompen en microgotas o solidifican. Sobre esos filamentos, monitorizados mediante imágenes de sombra por iluminación láser, se han realizado series de espectros Raman a distintas distancias axiales, lo que ha permitido medir la cristalización con una resolución temporal de ~10 ns. Se ha comprobado que la cristalización de *p* H_2 (y en menor medida la del *o* D_2) se retrasa notablemente por pequeñas cantidades de impurezas, más con Ne que con *o* D_2 , en un efecto de naturaleza cuántica no observado anteriormente. Estos experimentos se han completado con un modelo hidrodinámico de la temperatura del filamento en función de la distancia a la tobera, en colaboración con A. Gogolin, del Instituto Landau y T. Elizarova de la Academia de Ciencias Rusa, ambos de Moscú.

Con el fin de estudiar las colisiones inelásticas $H_2O:He$ y $H_2O:H_2O$, en la instalación (B) se han medido numerosas series de espectros Raman de chorros supersónicos de mezclas de H_2O y He, en concentraciones de 1,4%–34%, desde una tobera de 350 micras 398 K, y presiones $p_0=37-320$ mbar, empleando el nuevo sistema evaporador-mezclador que instalamos el año pasado. Se ha comprobado que todos estos chorros están libres de condensación de H_2O , requisito imprescindible para el análisis cuantitativo de la cinética colisional. Del análisis de la evolución temporal de las poblaciones rotacionales, obtenidas de la simulación de los espectros Raman, se han determinado unos coeficientes de transferencia promediados (tanto para colisiones $H_2O:He$ como $H_2O:H_2O$) para los 6 niveles más bajos de *orto*- H_2O a 40 y 100 K. Por otra parte, nuestras medidas han servido para validar los coeficientes de transferencia nivel-a-nivel $H_2O:He$ calculados por el grupo teórico de Dinámica e Interacciones del Instituto de

Física Fundamental del CSIC, con el que se trabaja en estrecha colaboración. Hay que destacar que los valores obtenidos por nosotros para las colisiones $\text{H}_2\text{O}:\text{H}_2\text{O}$ constituyen la primera información disponible para ese sistema, incalculable hoy en día por métodos teóricos.

Se ha completado un estudio de simulación del espectro vibracional del CO_2 a alta temperatura (~ 2000 K), en colaboración con la Universidad de Huelva. La simulación de este espectro no se había logrado hasta ahora por la fuerte resonancia de Fermi, que rompe drásticamente la aproximación armónica de modos normales, y el gran número de bandas calientes implicadas. Las funciones de onda se han obtenido a partir de un tratamiento algebraico del hamiltoniano vibracional, mientras que las derivadas de la polarizabilidad molecular se han refinado a partir de nuestras medidas. Con ello se ha simulado satisfactoriamente el espectro del CO_2 en una llama, lo que puede ser empleado para el diagnóstico de medios en combustión.

Por otra parte, se ha completado el análisis de las medidas de condensación de CO_2 en jets supersónicos desde una tobera laminar de $0,13 \times 3$ mm, mediante scattering Raman y Rayleigh, y su comparación con toberas circulares. En el chorro laminar, la formación de agregados (clusters) se inicia más tarde y progresa más lentamente, formándose agregados mayores, como consecuencia de que densidad y temperatura caen más suavemente que en el chorro circular. Se ha observado una correlación entre la aparición de agregados grandes y la relajación vibracional (casi inexistente en otro caso), lo que apunta a algún mecanismo mediado por colisiones con clusters grandes.

Finalmente, en colaboración con P. Skovorodko de la Academia de Ciencias Rusa, se han realizado cálculos fluidodinámicos (densidad y temperatura) de chorros supersónicos de mezclas de H_2 y N_2 , incluyendo la estructura de ondas de choque, basados en experimentos nuestros anteriores. Los acusados gradientes en densidad y temperatura de las ondas de choque, y la gran separación de los niveles rotacionales del H_2 , hacen que estos chorros de mezclas no se puedan describir con las ecuaciones Navier-Stokes (NS) convencionales. Por ello, se ha empleado un modelo de ecuaciones NS parabolizadas, incluyendo los efectos viscosos y de difusión. Salvo la posición de las ondas de choque laterales (que se sobreestima un 10%), los cálculos numéricos reproducen con gran precisión los detalles de los perfiles térmico y de densidad, la posición de las ondas de choque frontales, y la separación de especies en las mezclas.

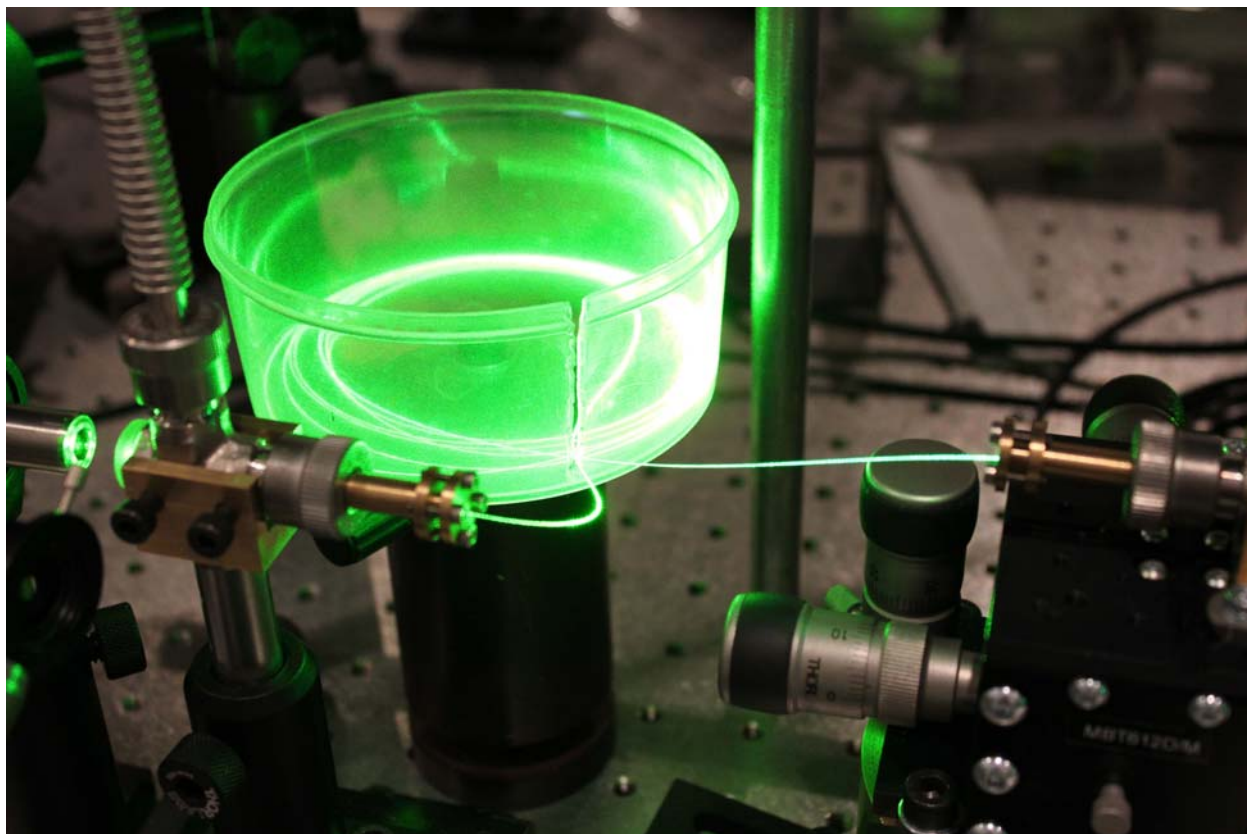
En el capítulo metodológico se ha desarrollado, a partir de las Ecuaciones de Navier-Stokes, un conjunto de ecuaciones fluidodinámicas libres de aproximaciones que permiten relacionar las variables de densidad, temperaturas rotacionales y traslacionales, velocidad, y entropía a lo largo de la zona de silencio paraxial de las expansiones supersónicas. Dichas ecuaciones incluyen un tratamiento explícito de los efectos disipativos debidos a las viscosidades de cizalla y volumen, y a la conductividad térmica. La finalidad de dichas ecuaciones es complementar la información sobre las variables no medibles directamente, como la temperatura traslacional y la entropía, y mejorar así la precisión de los datos experimentales. También se han perfeccionado los procedimientos numéricos para el tratamiento estadístico de datos experimentales de los chorros supersónicos.

En cuanto a la metodología para el estudio de colisiones inelásticas a partir de los datos de las expansiones supersónicas, se ha desarrollado el novedoso concepto de "average rate", o tasa promedio de colisión inelástica asociada a un nivel de energía. Esta magnitud física está demostrando un gran potencial para el análisis de los fenómenos colisionales que ocurren en el seno de las expansiones supersónicas.

Por último, en el capítulo computacional, se han obtenido tasas de colisión inelástica nivel-a-nivel de la molécula de *orto*- D_2 entre 20 y 300 K, y con ellas se ha verificado la exactitud de las ecuaciones de relajación y de viscosidad de volumen desarrolladas con anterioridad en el laboratorio.

ESPECTROSCOPIA LÁSER

Hemos continuado el desarrollo de la técnica de espectroscopía Raman estimulada con láseres continuos en el interior de fibras huecas de cristal fotónico. El objetivo de este trabajo es demostrar que la magnificación del efecto Raman estimulado debida a la confinación de la luz en un núcleo hueco de ~ 4 micras de diámetro, junto con una longitud de interacción 1-2 metros, es suficiente como para permitir el registro de espectros Raman de gases con alta resolución espectral empleando láseres continuos de baja potencia. Hemos registrado espectros de las ramas Q del doblete de Fermi $2\nu_2/\nu_1$ de CO_2 , resolviendo la estructura rotacional en $2\nu_2$ a 15 mbar. También se ha registrado la rama Q de O_2 a 1555 cm^{-1} . Respecto a los resultados previos empleando láseres continuos y célula multipaso, hemos obtenido un aumento de sensibilidad de un factor de ~ 300 , y de ~ 6000 respecto al régimen de foco único.



"Espectroscopía Raman estimulada en el interior de fibras huecas de cristal fotónico"

Los resultados actuales ya son competitivos con los de la técnica quasi-continua, y hemos identificado numerosas vías de mejora que permitirán una aún mayor sensibilidad de la técnica.

En paralelo a las anteriores actividades se han llevado a cabo estudios espectroscópicos de alta resolución, mediante el uso de la técnica de espectroscopía Raman estimulada, en varias especies moleculares:

- Acetileno monosustituido con ^{13}C ($^{13}\text{C}^{12}\text{CH}_2$). El estudio de esta especie se realizó en el marco de una colaboración ya existente con la Universidad de Bolonia, y cuyo objetivo principal es la modelización precisa de los niveles de energía rovibracionales en toda la familia de isotopólogos "comunes" (mono- o disustituidos con átomos de ^{13}C y D), del acetileno. Se ha registrado y analizado la banda fundamental ν_2 y todo el sistema de bandas calientes asociadas $\nu_2+\nu_4-\nu_4$, $\nu_2+\nu_5-\nu_5$, $\nu_2+2\nu_4-2\nu_4$ y $2\nu_2-\nu_2$ a diferentes temperaturas entre 298 y 355 K. La banda $2\nu_2-\nu_2$ se registró a 170 K mediante la técnica de doble resonancia Raman-Raman. El análisis de los resultados ha permitido obtener un nuevo conjunto de parámetros moleculares para esta especie que da cuenta de forma satisfactoria de las resonancias anarmónicas que se observan en el espectro.
- Tetróxido de osmio (OsO_4). Se registró el espectro Raman de la vibración de respiración (ν_1) de este trompo esférico en una muestra multiisotópica, lo que permitió la observación de la banda, en buenas condiciones de relación S/R, para los cuatro isotopólogos más abundantes ($^{192}\text{OsO}_4$, $^{190}\text{OsO}_4$, $^{189}\text{OsO}_4$, $^{188}\text{OsO}_4$). El análisis conjunto de los datos obtenidos de este experimento junto con otros provenientes de medidas anteriores, realizado en la Universidad de Borgoña (Dijon), ha permitido la determinación de la distancia de enlace del isotopólogo principal $^{192}\text{OsO}_4$.
- Tetrafluoruro de carbono (CF_4). Esta molécula ha despertado interés en estudios atmosféricos por su gran Potencial de Calentamiento Global (GWP), unas 6000 veces superior al del CO_2 , y su vida media de 50000 años en condiciones atmosféricas. El estudio de esta especie ya se inició en nuestro laboratorio en 2011, de nuevo en colaboración con el grupo de trompos esféricos de la Universidad de Borgoña (Dijon). Durante 2012 se han realizado medidas adicionales para complementar las llevadas a cabo en 2011, en concreto de las bandas ν_1 y $3\nu_2-\nu_2$. El análisis conjunto de toda la información obtenida ha permitido proponer un valor muy preciso para la distancia de enlace en equilibrio del CF_4 .

- Nitrógeno (N_2). Utilizando la técnica de doble resonancia Raman-Raman, que bombea población ópticamente a un estado vibracional excitado, se ha poblado el estado $v=1$ de esta especie para a continuación observarlo por espectroscopía Raman de alta resolución. Esto ha permitido realizar la observación a una temperatura de 77 K y una presión de 6 mbar, unas condiciones muy favorables que contrastan con anteriores observaciones de esta banda por otros grupos, realizadas a temperaturas de más de 1200 K y presiones cercanas a la atmosférica. El análisis del espectro ha arrojado valores de las frecuencias de las líneas y los parámetros moleculares más precisos que los hasta ahora disponibles., en especial para el origen de la banda y primeros niveles rotacionales.

FISICA 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 en una red óptica, sometidas a una combinación de campo eléctrico estático y campos láser intenso no resonantes. Se han investigado esquemas de combinación de frecuencias que permitan crear diferentes patrones geométricos de orientación de los dipolos en una red óptica en régimen tight binding. La interacción dipolar de largo alcance introduce propiedades macroscópicas radicalmente nuevas en un gas cuántico. El control de la distribución geométrica de la orientación de los dipolos en la red óptica posibilita un ajuste fino de estas propiedades.

Una aplicación muy importante de estos sistemas es la Computación Cuántica. Hemos continuado el estudio del control del entrelazamiento de dos moléculas dipolares en una red óptica. Para ello se manipula su orientación usando una combinación de campo estático y campos láser no resonante. Hemos iniciado la ampliación de este estudio al caso de tres moléculas en diferentes geometrías.

Es conocido que es posible obtener orientación molecular significativa mediante pulsos de THz de área nula. Hemos demostrado que a pesar de la existencia de una operación de simetría espacio-temporal es posible obtener orientaciones significativas al promediar sobre un periodo rotacional. Este fenómeno se debe a la existencia de interferencias entre estados propios del operador de evolución y puede ser usado para obtener orientación neta independientemente de la magnitud de la constante rotacional.

Se ha continuado el estudio de posibles inconsistencias del teorema adiabático de la mecánica cuántica. Hemos demostrado que el Hamiltoniano dual asociado a la inconsistencia de Marzlin-Sanders no cumple los requisitos básicos exigidos en la demostración estándar del teorema. Hemos demostrado también que dos condiciones simples pueden identificar sistemas para los que la aproximación adiabática falla a pesar de satisfacer las condiciones cuantitativas tradicionales que se creía garantizaban su validez. Finalmente hemos demostrado que la inconsistencia sólo aparece para Hamiltonianos que contienen términos resonantes cuya amplitud tiende asintóticamente a cero.

En colaboración con el Dr. Coudert de la Universidad de Paris se ha continuado el desarrollo del formalismo teórico para el cálculo de niveles de energía y funciones de onda de moléculas con una coordenada de gran amplitud en presencia de láseres intensos. La teoría se ha aplicado a moléculas de tipo bifenilo en las que tiene lugar una rotación interna entre los dos anillos. Los resultados obtenidos apoyan el mecanismo de ruptura, inducida por la rotación del alineamiento torsional previamente descrito por nosotros.

Gases Cuánticos Ultrafríos

Hemos continuado el estudio de generación de momento en un sistema de átomos o moléculas aplicando un potencial periódico en el espacio y en el tiempo de promedio cero. En ausencia de interacción, la generación de una corriente asintótica requiere la ruptura simultánea de la simetría espacial y temporal. Sin embargo, nuestro trabajo anterior 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.

Hemos estudiado el efecto de la interacción entre partículas en el modelo anterior y demostrado que podemos generar y controlar corriente asintótica finita para este sistema mediante una modulación pulsada del parámetro de interacción.

2A.4 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR

LÍNEAS DE INVESTIGACIÓN:

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

SUBLÍNEAS DE INVESTIGACIÓN:

- Nanoestructura de películas delgadas poliméricas.
- Nanocompuestos poliméricos: Estructura y propiedades físicas.
- Confinamiento en la estructura y la dinámica de la materia condensada blanda.
- Conformación de materia blanda biológica: Proteínas de membrana en disolución.
- Estudio de los procesos de microdeformación, relación con la nanoestructura y optimización de propiedades mecánicas.
- Primeros estadios de la cristalización de polímeros sometidos a campos de deformación de tipo cizalla.
- Estudio de la nanoestructura de materiales multilaminares mediante dispersión de rayos X a ángulos ultra-pequeños (USAXS).
- Desarrollo de la estructura y propiedades de polímeros naturales y 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 y elongación en poliolefinas y mezclas.
- Dinámica molecular y propiedades dieléctricas.
- Interrelación estructura-dinámica en materia condensada blanda polimérica.
- Microscopía electrónica tridimensional: Estudio estructural de macromoléculas biológicas.
- Hidrodinámica de proteínas y complejos macromoleculares biológicos.

TÉCNICAS UTILIZADAS:

- Dispersión y difracción de rayos X a ángulos grandes (WAXS), pequeños (SAXS), ultra-pequeños (USAXS) y con incidencia rasante (GISAXS), incluyendo el uso de micro- y nano-haces de radiación sincrotrón.
- Calorimetría diferencial de barrido.
- Dispersión cuasielástica de neutrones (IQNS).
- Microscopía óptica y de barrido (SEM).
- Espectroscopía Raman.
- Micro- y nano-dureza.
- Dispersión de neutrones.
- Espectroscopía dieléctrica de banda ancha.
- Reometría de cizalla en torsión dinámica y continua.
- Reometría de extrusión capilar y elongacional.
- Análisis dinamo-mecánico en flexión.
- Análisis mecánico en tracción: módulo elástico.
- Análisis mediante fraccionamiento por temperatura de cristalización.
- Microscopía electrónica de barrido y transmisión (STEM) y de fuerzas atómicas (AFM).
- Cromatografía de permeabilidad en gel (GPC) y tetradetección.
- Dispersión dinámica de luz láser (DLS).
- Litografía de nanoimpresión (NIL).
- Espectroscopía de correlación de rayos X (XPCS).
- Simulaciones mediante uso de computación de alto rendimiento.

LABOR INVESTIGADORA:

Grupo de NANOESTRUCTURA Y PROPIEDADES MECÁNICAS DE SISTEMAS POLIMÉRICOS

PELÍCULAS DELGADAS MULTILAMINARES

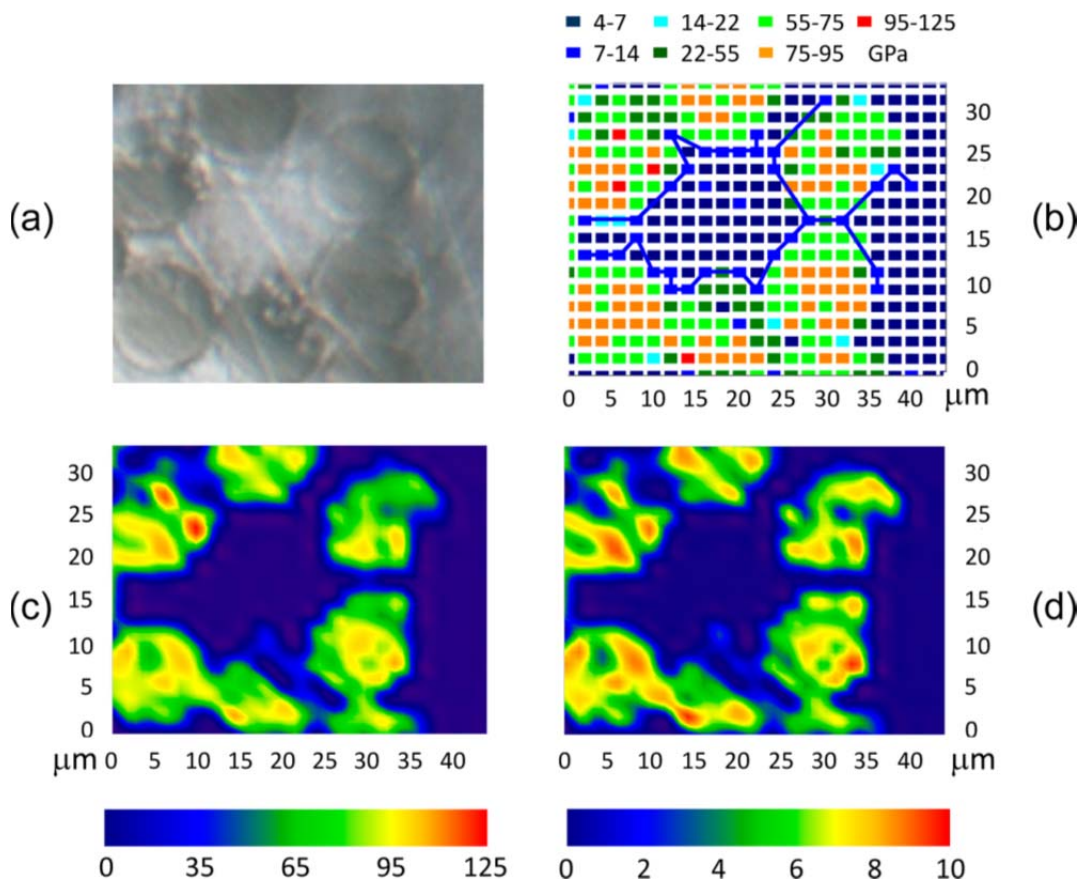
Continuando con el estudio de películas delgadas poliméricas multilaminares, se ha investigado el desarrollo de laminillas cristalinas en las láminas ultra-delgadas de un polímero cristalizante como el poli(tereftalato) de etileno (PET) confinado entre capas de policarbonato (PC) vítreo, en función del espesor de lámina por medio de técnicas de difracción de rayos X. Se ha seguido in situ la cristalización isoterma del PET desde el estado vítreo mediante difracción de rayos X a ángulos bajos (SAXS). Se ha encontrado que la disminución de dicho espesor influye sobre la nanoestructura de laminillas y favorece la aparición de orientación cristalina. Se ha observado la coexistencia de dos poblaciones de laminillas cristalinas, paralelas y perpendiculares a las superficies basales, en un amplio rango de temperaturas de cristalización y para espesores que disminuyen hasta los 35 nm. Las laminillas paralelas se originan con una velocidad de cristalización menor que el PET en volumen, dando lugar a cristales de tamaños similares pero separados por regiones amorfas más amplias. Además, cuando se disminuye el tamaño de lámina o se aumenta la temperatura de cristalización, la distribución del estado de orientación de las laminillas se hace más estrecha. En el caso de laminillas perpendiculares, las condiciones de cristalización también influyen en el desarrollo de la orientación cristalina; sin embargo, esta última se ve muy poco afectada por la disminución en el tamaño de lámina.

Los resultados obtenidos sugieren que las laminillas paralelas surgen como consecuencia del confinamiento físico, mientras que las perpendiculares responden a las interacciones con las intercaras de PC. Por otra parte, se ha estudiado también la morfología cristalina y la nanoestructura de una película delgada multilaminar formada por dos polímeros semicristalinos, polipropileno isotáctico (iPP) y poliamida 6 (PA6). Al contrario que en los experimentos anteriores, que era un sistema semicristalino/vítreo, las películas de iPP/PA6 no presentan un máximo de dispersión en el rango de USAXS. Esto es debido a una estructura laminar irregular, como se ha confirmado por medio de imágenes TEM. A pesar de ello, el defectuoso ensamblaje laminar todavía es capaz de influir en el modo de cristalización de ambos polímeros constituyentes. Por un lado, la cristalización de PA6 se ve substancialmente dificultada como se evidencia por la débil intensidad de dispersión. Sólo experimentos de SAXS y WAXS en función de la temperatura en tiempo real han sido capaces de detectar la presencia de máximos asociados a PA6 cuando se supera la temperatura de fusión de iPP. Por otra parte, las medidas de SAXS y WAXS a temperatura ambiente han puesto de manifiesto la morfología de laminillas orientadas en las capas de iPP existiendo una simetría uniaxial alrededor de un eje perpendicular a la superficie de las láminas. Los resultados han demostrado que las cadenas moleculares cristalinas están principalmente dispuestas de forma paralela a la superficie de las capas formando laminillas perpendiculares. Adicionalmente, los resultados de rayos X, han vuelto a sugerir la existencia de dos poblaciones de laminillas, perpendiculares entre sí, pero ambas perpendiculares a las superficies de las capas, lo cual concuerda con la morfología entrecruzada ("cross-hatched") observada mediante AFM.

PROPIEDADES MECÁNICAS DE SUPERFICIE DE MATERIALES COMPUESTOS JERÁRQUICOS

Los ensayos de nanoindentación, utilizando la opción de medida de rigidez continua (CSM), constituyen una técnica muy potente para la caracterización de las propiedades mecánicas de superficie a nivel local de películas y materiales compuestos heterogéneos poliméricos. La optimización de las propiedades de las interfaces en laminados polímero-fibra representa un gran reto en el desarrollo de materiales para aplicaciones estructurales extremas. Los materiales compuestos jerárquicos basados en nanotubos de carbono representan un camino prometedor para la producción de laminados polímero-fibra con una gran mejora de sus propiedades interlaminares. Un importante factor a tener en cuenta es la influencia del refuerzo de los nanotubos en las propiedades interfaciales entre la matriz polimérica y la microfibrilla. Se han utilizado medidas de nanoindentación para explorar las propiedades mecánicas de materiales compuestos jerárquicos (o multiescala) de nanotubos de carbono de pared única (SWCNT) que incluyen capas de fibras de vidrio alternando con las de una matriz de poli(éter éter cetona) (PEEK) reforzada con SWCNT.

La técnica CSM se ha aplicado para determinar el módulo elástico y la dureza, en la matriz, en la fibra y a través de la interfaz, en función de la profundidad de indentación a partir de unos 50 nm. Se ha comprobado que dicha técnica está plenamente capacitada para detectar la interfaz polímero-fibra. Es importante destacar que se ha logrado identificar una interfase una vez tenidos en cuenta los efectos de sesgado de las fibras. Se ha observado, además, que los SWCNT no sólo refuerzan a la matriz polimérica a escala nanométrica, sino que también mejoran las propiedades de la interfase con las fibras microscópicas. Representando un mapeado de las propiedades mecánicas, se pone de manifiesto como éste reproduce fielmente la topografía superficial y localiza de forma precisa las propiedades de la interfase en la frontera entre las fibras y la matriz. Como conclusión, se desprende que el refuerzo multiescalar puede ser una ruta adecuada para mejorar las interfaces en laminados polímero-fibra.



(a) Micrografía óptica de la región seleccionada para el test de nanoindentación. La superficie fue caracterizada mediante un conjunto de 23×18 indentaciones con una profundidad de 100 nm. (b) Representación de los valores reales del módulo reducido E_r en sus posiciones específicas X,Y. Graficas de contorno de E_r (c) y la dureza H (d) generadas por interpolación de los datos de indentación. La escala de colores (en GPa) aparece debajo.

NANOESTRUCTURA Y PROPIEDADES VISCOELÁSTICAS DE NUEVOS POLIELECTROLITOS

Los electrolitos basados en matrices poliméricas son de gran interés para aplicaciones en baterías de estado sólido. Recientemente, se han sintetizado una serie de nuevos electrolitos basados en poli (metacrilato de dimetil-amino-etilo) (PDMAEM). Con objeto de mejorar sus propiedades físicas, en este estudio (realizado en colaboración con el Dr. Romo Uribe, investigador de la Universidad Autónoma de México) se propuso el empleo de arcillas (montmorillonita, MMT) como material de refuerzo. La nanoarcilla se funcionalizó empleando dos surfactantes distintos (sulfobetaina y amonio) dando lugar a lo que se conoce como arcillas modificadas orgánicamente y que suelen presentar una mejor interacción nanoarcilla-matriz. El polímero protonado (PDMAEMH) fue mezclado en disolución con cada una de las arcillas funcionalizadas, en distintas proporciones (hasta un 5% w/w). Los primeros resultados mostraron un aumento muy notable, de más de 100 °C, de la temperatura de transición vítrea del material protonado respecto al de partida. En concordancia con esto, las medidas viscoelásticas mostraron que las interacciones iónicas del PDMAEMH dificultan en gran medida la dinámica molecular dando lugar a tiempos de relajación más largos. Además, se ha encontrado que el tipo y la cantidad de surfactante influyen en el módulo de cizalla de almacenamiento. Así, dicho módulo es mayor cuando se emplea amonio como surfactante frente a la sulfobetaina. El primero de ellos favorece la aparición de morfologías intercaladas mientras que la sulfobetaina promueve la exfoliación de las láminas de arcilla. Este resultado sugiere que la dinámica molecular se ve obstaculizada por el confinamiento de las cadenas entre las nanoláminas.

MEMBRANAS POLIMÉRICAS OBTENIDAS MEDIANTE ELECTROHILADO

La técnica de electrohilado ofrece la posibilidad de producir fibras con diámetros que abarcan un rango desde las micras a unos pocos nanómetros. De esta manera, las aplicaciones de un material polimérico pueden extenderse a otras áreas tecnológicas. En colaboración también con el grupo del Dr. Romo Uribe (UNAM, México), se ha investigado una serie de membranas poliméricas, obtenidas mediante electrohilado, con propiedades antibacterianas o biodegradables y que generan grandes expectativas incluyendo las membranas en las que se ha empleado el grafeno como material de refuerzo.

El poly(3-hidroxiobutirato) y sus copolímeros con poli-3-hidroxi valerato (PHB/HV) son materiales biodegradables y biocompatibles que generan grandes expectativas en el campo de la biomedicina. Sin embargo, su hidrofobicidad restringe su uso en aplicaciones donde el crecimiento celular es necesario. En este estudio se ha explorado la posibilidad de modificar la hidrofobicidad mediante la producción de fibras por electrohilado. Se ha investigado el efecto de las condiciones de electrohilado (concentración de la solución, voltaje) sobre la morfología de las membranas. El resultado más importante de este estudio ha sido que la hidrofobicidad de las membranas está fundamentalmente determinada por el diámetro de los filamentos que, a su vez, puede controlarse a partir de las condiciones de electrohilado.

El ácido poli (láctico) (PLA) es un poliéster biodegradable que se produce a partir de materiales renovables y sostenibles. El PLA es un excelente candidato para producir membranas poliméricas antibacterianas, de gran interés en el campo de la biomedicina. Se ha empleado la técnica de electrohilado para producir membranas de PLA con nanopartículas de plata incorporadas; con objeto de que las membranas adquieran propiedades antibacterianas. Los estudios de microscopía electrónica llevados a cabo muestran que las membranas de PLA están constituidas por una red de filamentos y gotas. Estas mismas características se han observado con la incorporación de las nanopartículas de plata, si bien en este último caso, los filamentos son de menor diámetro y la densidad de gotas notablemente menor. Las medidas de ángulo de contacto con agua han revelado que las nanopartículas de plata inducen un aumento muy significativo de la hidrofobicidad de las membranas, lo cual pone de manifiesto el potencial de este material como inhibidor de la actividad bacteriana.

En los últimos años, el grafeno ha surgido como uno de los materiales de refuerzo a nivel nanométrico más prometedores. La complejidad en la obtención de nanocompuestos poliméricos reforzados con grafeno reside en la difícil separación de una única capa de carbono adecuadamente dispersa en el medio circundante. En este estudio se han preparado membranas de poliamida 6,6 (PA6,6) reforzada con grafeno, mediante la técnica de electrohilado. Se siguieron los siguientes pasos: i) oxidación de polvo de grafito para producir óxido de grafito (GO); ii) reducción de GO en ácido fórmico y en presencia de PA6,6, mediante hidracina; iii) electrohilado de las soluciones de poliamida/grafeno. Los resultados de microscopía electrónica y difracción de rayos X revelan que la reducción química con hidracina sólo ha tenido un éxito parcial. Sin embargo, el estudio ha permitido extraer una serie de conclusiones a tener en cuenta en trabajos futuros y que a continuación se detallan. Se consiguieron membranas con filamentos de unas pocas decenas de nanómetros de diámetro. Las fibras de nylon presentan una estructura cristalina asociada a la fase pseudohexagonal del nylon6,6. Se ha observado, asimismo, que el grafeno induce en el nylon la estructura triclinica que más comúnmente se encuentra en este material a temperatura ambiente. Finalmente, se ha podido determinar que el grafeno (o bien GO) actúa como agente nucleante, aumentando los niveles de cristalinidad de las muestras.

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

ESTRUCTURA Y DINÁMICA DE MATERIA CONDENSADA BLANDA Y POLIMÉRICA NANOESTRUCTURADA EN TRES DIMENSIONES

Polímeros semicristalinos

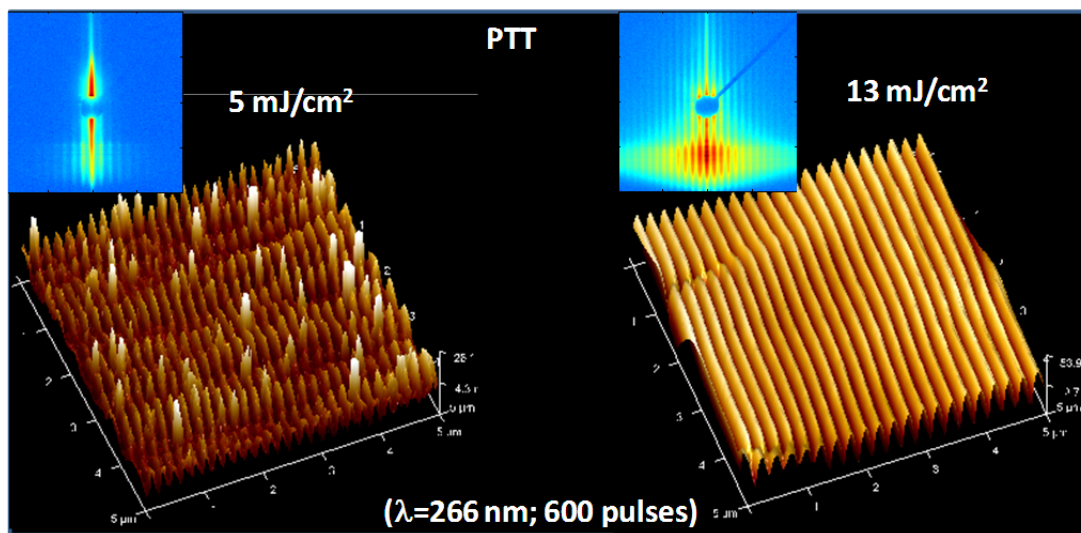
La relación entre la estructura y la dinámica en copolímeros al azar de poli (tereftalato de trimetileno) y poli (tereftalato de neopentyl) (PTT-PNT) han sido investigados por medio de dispersión de rayos X y de espectroscopia dieléctrica. Los resultados muestran que la incorporación de unidades de tereftalato de neopentyl en cadena de PTT disminuye la capacidad de cristalizar de los copolímeros resultantes, en comparación con la de PTT. La dinámica subvítrea de los copolímeros se caracteriza por la existencia de dos procesos, β_1 and β_2 . Hemos propuesto que β_1 está asociada con relajaciones secundarias asociado con la parte más flexible del monómero mientras que el modo de baja frecuencia β_2 ha sido asignado al carbono de los grupos éster ligado anillo aromático. Por el contrario, el poli (tereftalato de neopentyl) (PNT), presenta sólo un proceso subvítreo que tiene el mismo origen de la relajación de β_2 PTT. La dinámica segmental de los especímenes amorfos presenta el comportamiento esperado en función de la relación molar.

NANOFABRICACIÓN DE ESTRUCTURAS POLIMÉRICAS

Nanorejillas poliméricas

Hemos explotado plenamente las posibilidades de utilización de rayos láser con el fin de nanoestructurar la superficie de películas delgadas de polímeros. En cooperación con el grupo de la Dra. M. Castillejo (IQFR-CSIC) hemos tenido éxito en la nanofabricación inducida por láser de estructuras superficiales periódicas (LIPSS) en una serie de películas delgadas de polímeros preparadas por spin-coating que incluyen poli(tereftalato de etileno), poli(tereftalato de trimetileno) y poli(carbonato de bisfenol A). Hemos establecido una metodología para la

utilización de la difracción de rayos X en incidencia rasante en la investigación de este tipo de sistemas. La irradiación de las películas de polímero se hizo por pulsos láser de 6 ns a una longitud de onda de 266 nm. Esto produce nanosurcos característicos (nanogratings) con longitudes de período similar a la longitud de onda del láser. Además, hemos ampliado este enfoque mediante la demostración de la formación de LIPSS en polímeros con láser de femtosegundos. Es posible controlar el tamaño y la morfología de las estructuras periódicas asegurando la integridad química de las películas de polímero. Hemos propuesto que las nanoestructuras están formadas por la desvitrificación de la superficie de la película a temperaturas superiores a la temperatura de transición vítrea característica de los polímeros. La información estructural obtenida tanto por microscopía de fuerza atómica (AFM) y de dispersión de rayos X en incidencia rasante y de pequeño ángulo (GISAXS) se correlacionan satisfactoriamente. La comparación de los patrones de GISAXS experimentales y simulados sugiere que las estructuras LIPSS pueden ser bien descritas considerando una red paracristalina cuasi unidimensional y que los parámetros de irradiación tienen una influencia en el orden de dicha red.



Imágenes de Microscopía de Fuerzas Atómicas (AFM) y diagramas de dispersión de rayos X en incidencia rasante (GISAXS) (ángulo superior izdo.) de nanorejillas de Poly (trimethylene terphthalate) (PTT) preparadas por irradiación con Láser a diferentes fluencias. (I. Martín-Fabiani et al. Langmuir 28, 7938,2012).

Superficies funcionales para aplicaciones SERS

En cooperación con la Prof. Concepción Domingo del departamento de Física Molecular (IEM) hemos continuado explorando las posibles aplicaciones de las superficies nanoestructuradas de polímeros. En particular, se han preparado sistemas híbridos oro/polímero que consisten en capas de oro depositado por deposición láser pulsada (PLD) sobre películas delgadas nanoestructuradas poliméricas. Hemos explorado el potencial de estos sistemas como sustratos para mejorar la espectroscopia Raman amplificada por superficies (SERS). Se prepararon estructuras LIPSS en películas delgadas de poli(tereftalato de trimetileno) (PTT) por irradiación con láser con el cuarto armónico de un láser Nd: YAG (266 nm, duración de pulso de 6 ns). Los sustratos de polímeros nanoestructurados se recubrieron con una capa de oro de nanopartículas ensambladas por deposición por láser pulsado trabajando con el quinto armónico de un láser Nd: YAG (213 nm, duración de pulso de 15 ns). Diferentes tiempos de deposición dan como resultado espesores que van de unos pocos nanómetros hasta varias decenas de nanómetros. El análisis por microscopía de fuerza atómica y GISAXS mostró que el recubrimiento de oro conserva el relieve LIPSS. Se investigaron la capacidad de las nanoestructuras híbridas producidas como sustratos para el efecto SERS utilizando bencenotiol como molécula de prueba. Se verificó que la señal SERS en la nanoestructuras híbridas es sustancialmente mayor que la observada para un sustrato plano recubierto de oro.

Litografía por Nanoimpresión

Hemos continuado utilizando litografía por nanoimpresión (NIL) en polímeros en la sala blanca del Centro Nacional de Microelectrónica (CNM-CSIC, Barcelona). Se han investigado diferentes nanorejillas modelo de interés en nanotecnología basadas en polímeros y en silicio. Se ha usado la dispersión de rayos X de incidencia rasante a ángulo pequeño (GISAXS) para caracterizar estructuralmente los sistemas. Las nanorejillas exhiben diferentes patrones GISAXS con rasgos característicos que pueden ser asociados con su nivel de orden a lo largo de la dirección de la periodicidad y a la longitud de las líneas. Nanorejillas altamente ordenadas, hechas bien en silicio mediante litografía de haz de electrones, o bien nanofabricadas sobre películas delgadas poliméricas mediante litografía por nanoimpresión, exhiben patrones GISAXS caracterizados por semicírculos con máximos de

intensidad periódicamente distribuidos y cuyo radio está relacionado con el ángulo de incidencia usado. La simulación por ordenador indica que estas nanorejillas pueden ser consideradas como redes cristalinas unidimensionales. Nanorejillas poliméricas menos ordenadas preparadas por láser exhiben un patrón GISAXS caracterizado por franjas periódicas cuya intensidad disminuye con el aumento del ángulo de dispersión horizontal.

En este caso, las nanorejillas pueden ser consideradas como paracrystal unidimensionales. La transición de un diagrama de franja a uno de semicírculo se ha podido simular por ordenador y se puede atribuir a la contribución del factor de forma asociado a la longitud de las líneas que forman la nanorejilla. El valor de longitud crítica para la transición se encuentra en torno a unos pocos micrómetros.

Nanotubos y nanofibras poliméricas mediante plantillas de alumina

En colaboración con el Instituto de Microelectrónica de Madrid, se ha trabajado en métodos simples y controlables para la fabricación de arreglos ordenados de polímeros con interés en el campo de la energía y en el campo de la tecnología de la información. Durante este año se han preparado arreglos ordenados de nanohilos y nanotubos de poli (3-hexiltiofeno) (P3HT) mediante infiltración del polímero fundido en nanoporos de la plantillas de alumina a diferentes temperaturas. Dependiendo de la temperatura la infiltración se produce en el régimen de 'wetting' parcial o 'wetting' completo. Mediante dispersión de rayos X a bajo ángulo (SAXS) se ha que tales regimenes de 'wetting' (y por lo tanto la formación de nanohilos o nanotubos) se asocian con una estructura interna diferente en la fundido de P3HT. El comportamiento físico observado para P3HT podría ser extrapolable a otros polímeros semiconductores con arquitecturas moleculares similares tipo 'comb polymer' con aplicaciones en optoelectrónica, termoeléctricas y fotovoltaicas (otros poli (alquiltiofenos), polycarbazoles, polyfluorenes, polyphenylenes, etc.)

MATERIALES POLIMÉRICOS FUNCIONALES A TRAVÉS DE LA MEZCLA CON NANOPARTÍCULAS

Preparación de materiales compuestos conductores de nanotubos de carbono o grafeno

Se han preparado mediante spin-coating películas delgadas homogéneas y estables de poli (tereftalato de butileno) PBT y sus nanocompuestos basados en nanotubos de carbono de pared simple (SWCNT). Las películas delgadas de PBT muestran estructuras cristalinas esferulíticas para espesores superiores a 40 nm. En el caso de nanocompuestos, los nanotubos de carbono actúan como agentes de nucleación y proporcionan una plantilla para la cristalización de PBT. Esto da lugar a estructuras híbridas tipo shish-kebab, incluso en las películas más delgadas (≈ 10 nm de espesor). Para las películas delgadas PBT, la orientación de laminillas cristalinas sufre una transformación, cambiando de una disposición perpendicular al sustrato ("canto") a una disposición paralela ("plana") después de la recristalización. Usando microscopía Raman es posible observar directamente tanto el grado de dispersión como la ubicación de los nanotubos de carbono en las películas. Los resultados revelan que durante la cristalización de la matriz polimérica los grandes aglomerados actúan como puntos de nucleación más eficaces que los paquetes aislados de SWCNT.

En colaboración con los grupos de Prof. Z. Roslaniec de la Universidad de Tecnología de West Pomerania (Szczecin, Polonia) hemos investigado nanocomposites Polímero/Grafeno (EG) basados en poli (tereftalato de etileno) (PET). Los nanocompuestos se han preparado por polimerización in situ. La morfología de los nanocompuestos ha sido examinada por microscopía electrónica de transmisión (TEM). Se ha investigado la relación entre el método de preparación, la morfología y la conductividad eléctrica. Las imágenes TEM revelan que los nanocompuestos exhiben plaquetas de Grafeno bien dispersadas en la matriz polimérica. La incorporación de EG a la matriz de PET provoca una transición aislante-conductor para un umbral de percolación pequeño. Este hecho se ha atribuido a la alta relación de aspecto, gran área superficial, y la dispersión uniforme de las láminas de EG en la matriz de PET.

En colaboración con el grupo del Dr. M.A. López-Manchado (ICTP-CSIC, Madrid), hemos investigado nanocompuestos de caucho natural (NR) y Grafeno funcionalizados (FGS) preparados mezcla convencional en molino de dos rodillos. La morfología y estructura de la FGS se caracterizó confirmando el éxito de exfoliación del Grafeno por este procedimiento. La fuerte interacción entre la matriz de caucho y el Grafeno acelera la reacción de reticulación, aumenta la conductividad eléctrica y causa una importante mejora en el comportamiento mecánico de los materiales nanocompuestos. El Grafeno no afecta a la dinámica molecular del caucho mientras que la presencia de aditivos de vulcanización desacelera los movimientos segmentales y disminuye ligeramente la escala de tiempo de la dinámica global de la cadena de caucho. Estas propiedades funcionales hacen de estos nanocompuestos una nueva y prometedora clase de materiales avanzados.

PELÍCULAS DELGADAS COLUMNARES DE TiO₂

En colaboración con el grupo del Prof. A.R. González Elipe (Instituto de Ciencia de Materiales de Sevilla), hemos investigado distancias de correlación, porosidad y adsorción de agua en películas delgadas columnares de TiO₂. La porosidad y ciertas dimensiones críticas características de los sistemas estudiados impactan directamente en sus propiedades ópticas cuando se utilizan como plantillas para materiales compuestos con uso como recubrimientos antireflectantes en celdas solares y aplicaciones relacionadas.

PROPIEDADES DIELECTRICAS DE NANOCOMPUESTOS BASADOS EN POLÍMEROS TERMOPLÁSTICOS REVERSIBLEMENTE ENTRECRUZADOS

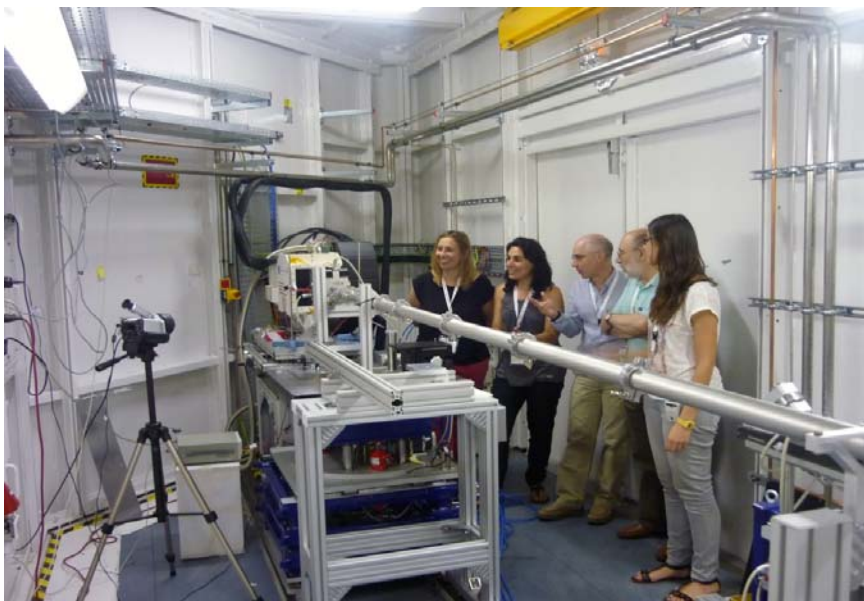
Continuando la colaboración con la Universidad Ferhat Abbas de Argelia y aprovechando la experiencia conseguida en este campo, hemos extendido nuestras investigaciones a algunos otros polímeros de interés creciente y ampliamente utilizados: poli(etilen tereftalato) PET, poli(etilen naftalen dicarboxilato) PEN, polimetilmetacrilato PMMA, y poli(fluoruro de vinilideno) PVDF. Además, nos interesa en particular aplicar el procedimiento para la obtención de nanocompuestos en un solo paso a la preparación de nanocompuestos de los polímeros anteriormente citados con arcilla, grafito y otros aditivos. Deseamos hacer un énfasis especial en el estudio de las propiedades dieléctricas de los materiales resultantes.

MICROSCOPIA DE FUERZA ATÓMICA (AFM)

Durante el año 2012 se ha implementado la instalación AFM con un sistema que permite adicionalmente a la visualización de estructuras nanoscópicas y la evaluación de las propiedades mecánicas (Módulo elástico, fuerzas de adhesión, deformación y nanoindentación), la medición del efecto piezoeléctrico (PFM). Las nuevas prestaciones incluyen la medida de la polarización remanente en muestras ferroeléctricas con resolución nanométrica. La técnica se ha probado con éxito en nanorejillas poliméricas ferroeléctricas.

Primeros usuarios de la línea de Difracción No Cristalina del sincrotrón español ALBA

En julio de 2012, un equipo de la SOFTMAPOL fue el primero en usar la nueva línea de luz de sincrotrón para difracción no cristalina (NCD) en el sincrotrón español ALBA. En una propuesta aprobada por el comité científico, y en colaboración con la empresa FAE SA, se investigó el efecto PTC de una serie de materiales compuestos basados en nanofibras de carbono utilizando una combinación simultánea de medidas de dispersión de rayos X a ángulos altos (WAXS), fotografía térmica e impedancia eléctricas. Por requerimiento, se elaboró un informe sobre el desempeño de la línea que se remitió al equipo de dirección. Es previsible que el rendimiento de la línea alcanzará pronto el nivel requerido de competitividad internacional y nuevos proyectos están actualmente en preparación.



Miembros del grupo SOFTMAPOL durante las primeras medidas en la línea “Non Crystalline Diffraction (NCD)” del sincrotrón español ALBA (<http://www.cells.es/>)

Grupo de BIOFÍSICA DE SISTEMAS MACROMOLECULARES

SIMULACIÓN MULTIESCALA DE FENÓMENOS FÍSICOS EN SISTEMAS MACROMOLECULARES

Dinámica molecular de polímeros en el fundido

Hemos realizado simulaciones atomísticas de las dimensiones moleculares y dinámica de fundidos enmarañados lineales y con una cantidad variable de ramificación corta de hasta 55 ramas por 1000 átomos de carbono. Esto ha sido posible gracias al uso combinado de simulaciones de Monte Carlo y Dinámica Molecular avanzadas para equilibrar las moléculas en todas las escalas espaciales. Las simulaciones se han comparado de forma muy satisfactoria con los resultados publicados experimentalmente y con recientes aproximaciones teóricas.

Se ha estudiado mediante simulaciones de Monte Carlo que alteran la conectividad el efecto de la introducción de α -olefinas (comonomero) sobre las propiedades físicas de polietilenos con ramificación corta (SCB) en estado fundido a 450K. Los cálculos de dimensiones, de dimensiones del tubo y parámetros de solubilidad concuerdan excelentemente con los datos experimentales. Las relaciones de escala tanto para los fundidos SCB como para las mezclas de PE están de acuerdo con el modelo de contacto binario y no coinciden con las del modelo de empaquetamiento. Este trabajo es una colaboración con la NTUA y Mitsui Chemical.

Modelos de grano grueso para simulaciones del proceso de cristalización de polímeros

Se ha desarrollado un modelo de grano grueso (PE-CG) para el estudio del proceso de cristalización de polietilenos lineales y con ramificaciones cortas. Se ha evaluado el modelo PE-CG y se muestra que tiene un comportamiento correcto durante los procesos de enfriamiento (cristalización) y calentamiento (fusión). El modelo es capaz, al menos de forma cualitativa, de reproducir las temperaturas de fusión, cristalización, tamaño de núcleo y largo espaciado durante los estados tempranos en la cristalización/fusión en función de la arquitectura molecular de estas poliolefinas.

Estudios teóricos sobre catalizadores de polimerización

La copolimerización de etileno y metilacrilato (MA) catalizada por los nuevos catalizadores organometálicos PymNox basados en Ni se ha estudiado computacionalmente. Los resultados experimentales muestran que los catalizadores no substituidos son incapaces de incorporar MA, mientras que los substituidos con metilo si producen copolimeros. Basado en los perfiles energéticos calculados, se propone un mecanismo de Curtin-Hammet para explicar la diferente reactividad de los catalizadores. Este modelo proporciona pistas sobre el diseño de nuevos catalizadores para producir poliolefinas funcionalizadas basadas en polietileno.

Se han aplicado herramientas quimiométricas 3D-QSAR para analizar la actividad de polimerización de una serie de catalizadores zirconocenos con diferentes sustituyentes en los anillos ciclopentadienilos. La selección de los conformeros más estables se realizó mediante análisis conformacional de los diferentes catalizadores. Los modelos QSAR calculados se han evaluado siguiendo un protocolo de “scrambling” que ayuda a examinar la redundancia en el espacio de descriptores. El modelo presenta una buena capacidad predictiva cuando se testea con una serie de cuatro catalizadores no presentes en el conjunto de entrenamiento.

Desarrollo de campos de fuerza para líquidos iónicos

Los líquidos iónicos (ILs) son sales formadas por un gran número de combinaciones de diferentes cationes y aniones. De esta manera, los ILs se pueden fabricar a medida para obtener propiedades fisico-químicas de interés industrial. Durante este año, se han estudiado los líquidos iónicos $[EMIM]^+[B(CN)_4]^-$ y $[C_nMIM]^+[Tf_2N]^-$ ($n=4,8,12$) debido a sus atractivas propiedades termofísicas tales como muy baja viscosidad y alta estabilidad térmica y química. Se han desarrollado los campos de fuerza necesarios mediante cálculos cuánticos para realizar simulaciones de dinámica molecular que permiten calcular las propiedades termodinámicas, estructurales y dinámicas. Las propiedades termodinámicas y estructurales están en muy buen acuerdo con los resultados experimentales. Las propiedades dinámicas, si bien dan resultados cualitativos razonables, se deben de mejorar para una mayor capacidad de predicción. Este trabajo se ha llevado a cabo en colaboración con Prof. Ioannis Economou (Chemical Engineering Department of Texas A&M University at Qatar), Dr. Nuno Garrido (Universidade do Porto), Dr. Andreas Fröba y Mr. Thomas Köller (University of Erlangen-Nuremberg).

MOVILIDAD, ORDEN Y NANOESTRUCTURA EN SISTEMAS MACROMOLECULARES

Se ha llevado a cabo un estudio exhaustivo de las propiedades físicas de modelos moleculares de poliolefinas, sus mezclas, así como de sistemas compuestos de poliolefinas con nanotubos de carbono, tanto en el estado fundido

como en el estado sólido. Estos estudios se han realizado en el marco de colaboraciones con distintos grupos de investigación, tanto industrial como académico.

El estudio de las propiedades de los modelos homogéneos ha permitido distinguir un claro efecto, muy discutido en la literatura, de las ramificaciones de cadena corta (debidas al comonomero) en la movilidad de las cadenas en el fundido. El resultado experimental está en perfecta consonancia con simulaciones realizadas a nivel atómico a la luz del modelo de reptación de Gennes.

En cuanto a sistemas polidispersos, hay que destacar que se producen importantes efectos emergentes, ligados a interacciones macromoleculares específicas, que provocan propiedades interesantes como fuertes incrementos en las características elásticas, con profundas implicaciones en la procesabilidad. Los ensayos realizados con polímeros experimentales, extremadamente polidispersos permiten establecer el origen de la extrema elasticidad, asociada a la existencia de colas de peso molecular extremadamente alto.

Asimismo, se ha podido estudiar el efecto que causa la arquitectura molecular de las matrices poliméricas en las propiedades físicas en nanocompuestos de nanotubos de carbono. Se han elaborado muestras con un alto grado de dispersión de los nanotubos, gracias a que los mismos se hayan recubiertos de polímero. Se ha detectado un interesante efecto del peso molecular de la matriz en las propiedades viscoelásticas lineales, especialmente la viscosidad Newtoniana y la capacitancia en el estado estacionario. A la luz de los resultados, el peso molecular de la matriz parece afectar enormemente a la red percolativa y a las características viscoelásticas del sistema. Los resultados obtenidos pueden tener importantes implicaciones a nivel básico y aplicado.

En cuanto a las propiedades en el estado sólido, el estudio de sistemas modelo ramificados mediante distintas técnicas experimentales, como la calorimetría diferencial de barrido, espectroscopía Raman, rayos X y análisis mecánico, ha permitido ahondar sobre el efecto de la compleja estructura de fases en las propiedades macroscópicas, y que puede ser explicado, al menos de modo cualitativo, mediante la aplicación de modelos mecánicos.

SIMULACION DE SISTEMAS MACROMOLECULARES BIOLÓGICOS

Receptores de factor de crecimiento epitelial (EGFR)

Los receptores del factor de crecimiento epitelial (EGFR o ERBB) están asociados con varios procesos biológicos de crecimiento y proliferación celular y están siendo considerados unas dianas importantes en terapias para tratamiento del cáncer. Hemos construido modelos basados en modelización por homología para ErbB2-ErbB3, ErbB3 y ErbB4 con heregulina en sus conformaciones activas, seguido de un refinamiento de los modelos mediante dinámica molecular atómica.

El uso de trastuzumab, un anticuerpo monoclonal, ha sido éxito como tratamiento terapéutico, ya que interacción con el dominio extracelular del ErbB2(ErbB2-ECD). Un entendimiento detallado de cómo es la interacción entre el receptor y el anticuerpo es de un interés primordial para el diseño de otras terapias anti-cáncer efectivas. Se han realizado simulaciones atómicas de dinámica molecular junto con análisis de fluctuaciones a través del análisis de componentes principales (PCA) para el complejo ErbB2/trastuzumab. Los resultados de la simulación están en excelente acuerdo con la información experimental disponible. Se ha reportado por primera vez un movimiento del anticuerpo hacia el dominio de dimerización del ErbB2.

BIOFÍSICA: ESTRUCTURA TRIDIMENSIONAL E HIDRODINÁMICA DE PROTEÍNAS Y COMPLEJOS BIOMACROMOLECULARES

El estudio de la estructura y propiedades físicas de macromoléculas biológicas como las proteínas y otros complejos macromoleculares permite obtener información sobre cuál es su función en su contexto biológico. Con este fin, se han estudiado proteínas de diferente índole:

- (i) Anti-porteador de membrana Na^+/H^+ SOS1 de *Arabidopsis thaliana*.
- (ii) Receptores del factor de crecimiento EGFR o ErbB.
- (iii) Complejos de la cápsida vírica del HIV (proteínas gp).
- (iv) Cápsidas virales sintéticas (Virus Like Particles VLPs).
- (v) Reflectinas y sus mutantes.

Estos estudios se han realizado en colaboración con otros grupos, tanto nacionales (Departamentos de Cristalografía y Biología Estructural y Química Física Biológica en el IQFR/CSIC) como internacionales (Sino Biological Ltd., Beijing), concretamente en el estudio de proteínas de membrana involucradas en los canales iónicos de ciertas

plantas (“Cover Picture” en Journal of Molecular Biology), en procesos de señalización celular relacionados con el cáncer o el virus del HIV, o responsables de respuestas específicas a la luz visible en ciertos animales (Reflectina). Gracias a ellos estamos aportando información sobre las dimensiones y la dinámica de estos complejos macromoleculares muy útil para identificar como se organizan en el espacio, así como para establecer posible interacciones con otros agentes. Las macromoléculas y complejos sometidos a estudio están implicadas en procesos tan importantes para la célula como son los mecanismos de detección de señales externas, adaptación al medio y transformación celular, o pueden ser utilizados en biotecnología y medicina.

MICROSCOPIA ELECTRÓNICA DE TRANSMISIÓN en BIOPHYM

La instalación de microscopía electrónica de transmisión del BIOPHYM ha sido utilizada para visualizar diferentes tipos de sistemas complejos estudiados por diversos grupos del IQFR, ICTP e IEM del CSIC. En estos trabajos se han estudiado las características estructurales y morfológicas de nanopartículas y materiales poliméricos o materiales compuestos de ambos. En la mayoría de los casos las muestras se estudiaron bien como partículas independientes dispuestas sobre las rejillas de microscopía o como secciones ultra-finas. A continuación se enumeran algunos de los sistemas estudiados:

- Nanopartículas de platino, plata, oro, óxido metálico y “quantum dots”.
- Nanopartículas de oro recubiertas de sílice.
- Magnetita recubierta de oro, plata, sílice.
- Secciones ultrafinas de matrices poliméricas reforzadas con cargas como, por ejemplo, nanopartículas de carbono, titanio, nanoarcillas, nanotubos de carbono, grafeno, etc.
- Micelas y vesículas poliméricas.

En la mayoría de los casos se pretendía conocer la nanoestructura de las partículas o la dispersión y organización de las nanocargas en matrices poliméricas.

CHAPTER 2B
RESEARCH ACTIVITIES

2B.1 THEORETICAL PHYSICS AND CHEMISTRY DEPARTMENT

RESEARCH LINES:

- Gravitation and Cosmology.
- Condensed Matter Theory.
- Theoretical Nuclear Physics: Structure and Reactions.
- Theoretical Physical-Chemistry applied to Astrophysics.

RESEARCH SUBLINES:

- Loop Quantum Gravity and Cosmology.
- Classical and Quantum General Relativity.
- Computational methods in gravitational physics.
- Black hole analogs in condensed matter.
- Strongly correlated and mesoscopic systems.
- Electroweak processes in nuclei.
- Nuclear Structure from a selfconsistent correlated mean field approach.
- Three-body techniques in Nuclear Physics.
- Reactions of relevance in Nuclear Astrophysics.
- Inelastic non-reactive collisions at low temperatures.
- Theoretical spectroscopy of molecular species relevant for astrophysics and atmosphere.

EMPLOYED TECHNIQUES:

- Theoretical and mathematical physics.
- Computational methods.
- Renormalization group.
- 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:

GRAVITATION

The Gravitation and Cosmology Group has kept on during this year carrying on its research on the effects of inhomogeneities in Quantum Cosmology. This research has focused on two fronts. On the one hand, a detailed study has been performed on the quantization of scalar fields in nonstationary curved spacetimes, a generic situation in cosmology. This study has led to powerful theorems about the uniqueness of the quantization when two rather natural requirements are imposed: first, the invariance of the vacuum under the spatial symmetries of the field equations; and second, the unitarity of the quantum dynamics, in order to preserve the standard probabilistic interpretation of Quantum Mechanics. The case of spacetimes with compact spatial sections of flat topology has been studied with special care, owing to its physical interest, since present observations of the Universe support its spatial flatness. In this way, it has been possible to prove the uniqueness both of the Fock representation employed in the quantization and of the choice of canonical pair for the field when time dependent canonical transformations are allowed in the system. It is natural to consider this type of transformations in nonstationary backgrounds. Their inclusion modifies the dynamics, and would imply an ambiguity in the description selected for the field if it we could not appeal to the uniqueness results mentioned above. The conclusions reached in the case of flat topology have been extended later to any compact spatial topology, attaining conclusions of a remarkable generality. These uniqueness theorems provide robustness to the physical predictions of the theory, which would be otherwise plagued with an infinite ambiguity.

In the same topic of fields in nonstationary curved spacetimes, besides, a theoretical formalism has been developed for the description of cosmological perturbations in shear-free Bianchi III type models. This formalism allows one to face the study of primordial perturbations in scenarios with anisotropy, and hence to discuss the possible observational consequences, a study of great interest owing to the recent indications suggesting that privileged axis might exist in cosmology.

In addition, the theory of cosmological perturbations has been revisited in the case of isotropic and homogeneous spacetimes, conventional in cosmology, applying the results of the Group about the uniqueness of the Fock quantization of such perturbations. Furthermore, this privileged Fock quantization has been combined with the quantization of the homogeneous and isotropic background by means of loop techniques, in the framework of Loop Quantum Cosmology. This hybrid quantization approach, proposed by the IEM Group, has permitted the construction of a complete and consistent quantum model for the description of primordial perturbations in a Universe filled with a massive scalar field, case in which it is known that there exist regimes in which enough inflation is generated, therefore providing a physically realistic scenario.

Still in the context of quantum field theory in curved spacetimes, the structure of the renormalized stress-energy tensor of a massless scalar field in a 1-dimensional curved spacetime, as obtained by two different strategies, has been explicitly compared. The two strategies are: normal-mode construction of the field operator and one-loop effective action. These two potentially different renormalized stress-energy tensors have been shown to be actually equal, when using vacuum-state choices appropriately related. Some of the hybrid classical-quantum models proposed in the literature have been reappraised, with the goal of retrieving some of their common characteristics. The formalisms used in those models have been shown that generally entail the necessity of dealing with additional degrees of freedom beyond those in the straight complete quantization of the system.

On the other hand, the evolution of the entanglement of a non-trivial initial quantum field state has been analyzed when it undergoes a gravitational collapse, discussing what kind of problems can be tackled using the formalism spelled out here, as well as singling out future avenues of research. From another viewpoint, a vacuum state in a black hole spacetime can be analyzed in terms of how it is perceived (in terms of particle content) by different observers by means of an effective-temperature function. A general analytic expression for the effective-temperature function has been found which, apart from the vacuum state choice, depends on the position, the local velocity, and the acceleration of the specific observer. A clear physical interpretation of the quantities appearing in the expression has been given, and its potentiality illustrated with a few examples.

Another trend of investigation is the one focused on effective quantum spacetimes with multifractal geometry, whose properties change with the probed scale. The main objectives are to construct a self-consistent quantum field theory dynamics and explore its renormalization properties, and with that proceed to develop formalism for classical gravity in multifractal spacetimes, cosmological scenarios and their phenomenology.

As far as the study of black hole entropy in Loop Quantum Gravity is concerned, we have started a program to rigorously study quantum field theories in the presence of boundaries, concentrated, especially in their Hamiltonian formulation. One of the most important conceptual problems in this area is related to the interpretation of the degrees of freedom responsible for the black hole entropy. Black holes in LQG are modeled by introducing the so-called isolated horizons. At present the standard interpretation of the resulting model suggests that there are no classical degrees of freedom that can be exclusively associated to the boundary that represents the horizon and, therefore, the degrees of freedom that account for the entropy must have a purely quantum origin. The problem with this point of view is that the identification of the classical degrees of freedom demands a rigorous treatment incorporating, in particular, important aspects related to the functional spaces to which the classical fields belong. In order to achieve this goal the methods based on the traditional Dirac algorithm are not good enough and it is necessary to use geometrical techniques adapted to the infinite-dimensional character of the configuration spaces of field theories. Among these methods the geometric algorithm of Gotay-Nester-Hinds is especially useful. It has been used already to rigorously derive the Hamiltonian formalism for linear theories in the presence of boundaries and determine if the boundary conditions admit an interpretation as constraints in the traditional sense. The models considered so far have been the scalar and electromagnetic fields with Dirichlet and Robin boundary conditions. They have been fully characterized and the constraint differential submanifolds where the dynamics takes place have been found. In addition we have obtained a detailed description of the Hamiltonian vector field whose integral curves define the dynamics. In order to achieve this goal it has been necessary to introduce the appropriate functional spaces (Sobolev spaces associated to some of the differential operators that play a role in these models). At present, these results are being extended to parameterized theories to understand in detail several aspects associated with their polymer quantizations.

STRONGLY CORRELATED AND MESOSCOPIC SYSTEMS

Graphene

In the path towards a carbon-based molecular electronics, there are some features of the graphene layer that may represent a drawback for the design of efficient electronic devices, the most important being the absence of a gap in the electronic spectrum. Yet the question about the possible use of graphene as an alternative to conventional semiconductors is not settled at present. The investigation of the electron system faces the difficult problem of predicting the effects of a large electron-electron interaction, with the potential to induce strong correlations and the consequent formation of ordered phases of charge, current and spin. In this respect, the purpose of the research carried out during the last year has been twofold, seeking to show that (a) monolayer graphene can be forced to have a transition with condensation of microscopic loop currents, leading to persistent electronic currents across macroscopic domains under suitable conditions, and (b) graphene bilayers can develop superconducting and ferromagnetic instabilities in rotationally faulted stacks, as a result of the divergent density of states accumulated in such systems at low energies.

Regarding the graphene monolayer, we have shown that the dynamical generation of a parity-breaking mass term can take place in the theory of Dirac fermions in graphene, assuming that the long-range Coulomb repulsion is the relevant interaction between electrons. In this study, the dynamical symmetry breaking has been investigated analyzing the corresponding order parameter and comparing it with the more conventional effect of exciton condensation breaking chiral symmetry but preserving parity. The generation of the usual parity-invariant mass corresponds to the condensation of the staggered fermion density. Now we have shown that the parity-breaking mass can also arise dynamically for sufficiently large interaction strength, induced by the nonvanishing expectation value of the loop fermion current. Computing in the ladder approximation, the critical interaction strength for the development of the parity-breaking mass turns out to be actually below the critical strength for the exciton condensation. We have seen that these critical couplings arise as limiting values in the definition of the relevant electronic correlators, whose perturbative series have a finite radius of convergence. Thus, we have analyzed the dynamical symmetry breaking by looking at the vertex functions built from the operators giving the respective order parameters. We have checked that our approach of summing the series of ladder diagrams provides a sensible framework for the characterization of the dynamical symmetry breaking, as it leads to a critical coupling for the excitonic instability that coincides exactly with the value obtained from the resolution of the gap equation (available in this case only in the absence of electron self-energy corrections). The confidence on the diagrammatic many-body approach has been also reassured by the fact that the ladder sum supplemented by the electron self-energy corrections automatically preserves the underlying gauge invariance of the theory. This has been shown explicitly in the computation of the vertex for the electronic current, whose corrections coincide identically with those of the Fermi velocity renormalization, as demanded by the gauge invariance.

Turning to the twisted graphene bilayers, we have investigated the strongly correlated phases that may arise in such systems as a consequence of the large density of states they accumulate at low energies. Previously, we had already shown that the interlayer coupling plays the role of a background gauge field across the twisted bilayers, explaining in this way the recurrent development of flat zero-energy subbands in these systems. Now we have exploited the fact that these subbands must lead to strong electronic correlations, with a tendency to develop superconducting and ferromagnetic instabilities, as they induce in the electronic spectrum a Van Hove singularity (already observed experimentally) with divergent density of states. We have tested the viability of a superconducting instability starting from a purely repulsive electron-electron interaction, elaborating from ideas that were proposed long ago by W. Kohn and J. M. Luttinger. In our case, the electron pairing relies on the ability to tune the Fermi level close to the divergent density of states in the spectrum. We have seen that the effect of the saddle points in the electronic dispersion is able to produce then a strong modulation in the screening of the Coulomb interaction along the Fermi line, inducing in turn some negative (attractive) couplings when projecting the effective interaction into the different normal modes according to the symmetry of the electronic dispersion. This attractive interaction is enough to trigger the superconducting instability, though the actual magnitude of the negative couplings may depend on the fine tuning of the Fermi level to the Van Hove singularity and other factors like the disorder in the system. We have also matched this pairing instability against the possibility of having a magnetic instability from the large density of states. The tendency towards antiferromagnetism has been discarded in the superlattice structure of the twisted bilayers, as the low-energy states prefer to confine the charge with the formation of a triangular array of quantum dots (as observed experimentally). A preliminary study has shown however that the divergent density of states at the Van Hove filling may trigger a ferromagnetic instability, consistent with a large uniform magnetic susceptibility that can be arbitrarily enhanced by lowering progressively the temperature and tuning the Fermi level to the Van Hove singularity.

Exactly solvable models

The Lipkin -Meshkov-Glick (LMG) was introduced in nuclear physics in the 60's to describe the behavior of closed shell nuclei. Later on, the model demonstrated to be test many-body approximations in other areas of physics like quantum spin systems, ion traps, Bose-Einstein condensates in double wells and circuit QED. The model was also used to study quantum phase transitions, entanglement properties and quantum decoherence. We show that the model arises as a particular limit of the Richardson-Gaudin (RG) integrable model and we study the phase diagram with 1^o, 2^o and 3^o transition in terms of the roots of the RG equations that completely determine the exact wave function of the ground state.

Quantum transport

We study the effect of strong correlations in transport through quantum dots and if these kind of correlations could be behind the transition between the mesoscopic regime and the universal regime in the behavior of the transmission phase through quantum dots measured by Aharonov-Bohm interferometry. For the calculation of the conductance we use the embedding method in combination with the Density Matrix Renormalization Group algorithm. The results show that increasing the strength of the electronic interaction we reduce the Coulomb blockade resonance width and we separate one resonance from the next but we do not induce a transition between the mesoscopic and universal regimes of the transmission phase and we do not systematically change the number of transmission zeroes. These results support our previous work in which wave-function correlations due to chaoticity in the dots and not electronic correlations due to interactions were responsible for the crossover between the mesoscopic and universal regimes.

Composite boson mapping for lattice boson systems

We have studied a mapping that transforms boson operators into a quadratic product of composite bosons. The mapping is canonical and preserves the matrix elements of the physical operators when enforcing a resolution of the identity over the mapped operators (physical constraint). As a first application, we map the 2D Bose-Hubbard Hamiltonian into a 2x2 composite boson Hamiltonian. The Mott insulator-superfluid phase diagram, obtained by a composite boson mean field approximation, shows a remarkable agreement with Quantum Monte Carlo results and it is competitive with other state-of-the-art approaches that entail higher computational costs. This new formalism will be used to study cold bosonic atoms loaded in frustrated optical lattices for which the Monte Carlo method could not be used due to sign problems.

THEORETICAL NUCLEAR PHYSICS

Nuclear deformation effects on the Gamow-Teller strength distributions

The Gamow-Teller (GT) nuclear response is a very fertile source of information about important issues related not only to nuclear physics, but also to astrophysics and particle physics. In the case of unstable nuclei this information is mainly extracted from beta decays, where there is a severe restriction due to the Q-energy limitation. In the case of stable or close to stability nuclei, the GT strength is obtained from charge-exchange reactions at intermediate incident energies and forward angles. Under these conditions the nuclear states are probed at small momentum transfer, and the cross section becomes proportional to the GT matrix element without the energy limitations that characterize beta decays. The spin-isospin GT nuclear properties in ⁷⁶Ge and ⁷⁶Se are among the most extensively studied both theoretically and experimentally. This is due to their significance as double-beta decay partners and the implications of this process to determine the neutrino nature and its absolute mass.

We have studied the ability of the deformed proton-neutron quasiparticle random-phase approximation (QRPA) to describe together all the rich information available at present that includes (i) the global properties of the GT response, such as the total GT strength and the location and strength of the GT resonance, (ii) the GT strength distribution in the low-lying excitation region that contains much more accurate information, and (iii) the two-neutrino double-beta (2nbb) decay matrix element and the implications of the single beta branches in the 2nbb process. Then, we have studied the GT strength distributions in the daughter nucleus ⁷⁶As reached from both ⁷⁶Ge and ⁷⁶Se double-beta decay partners. Calculations from a deformed QRPA approach with particle-hole and particle-particle residual interactions based on a self-consistent Skyrme Hartree-Fock mean field with pairing correlations are compared with data from (p,n) and (n,p) charge-exchange reactions and their associated high resolution (3He,t) and (d,2He) reactions. Using quadrupole deformations compatible with the equilibrium shapes obtained from the SLy4 interaction, which lie within the experimental values, we obtain reasonable agreement with experiment in both single-beta branches, GT⁻ in ⁷⁶Ge and GT⁺ in ⁷⁶Se, as well as with the nuclear matrix element of the 2nbb decay process, extracted from the experimental half-life. It has been shown

that nuclear deformation plays a significant role in understanding the GT strength distribution, as well as in understanding the 2nbb decay process, where differences between parent and daughter nuclear deformations introduce a reduction factor in the nuclear matrix elements that finally determines the 2nbb half-lives.

Evolution of the nuclear structure with the number of nucleons

We have continued with the study of the nuclear structure evolution as a function of the nucleon number with special attention to the nuclear shape evolution, which is focusing at present a lot of interest both theoretical and experimentally. We have studied bulk and spectroscopic properties in various mass regions of even-Z isotopic chains that include both even-even and odd-N nuclei. We use a selfconsistent Hartree-Fock-Bogoliubov (HFB) mean field formalism based on finite range energy density functionals of Gogny type. We explore not only the predictions of the well known D1S parametrization, but also those of the most recent D1M. We construct and analyze the triaxial energy surfaces that provide the landscape of the energy as a function of the quadrupole deformation parameters. Then, we study the bulk properties of the nuclear ground states, such as binding energies, nuclear deformations, two-neutron separation energies, charge mean-square radii or spin-parity assignments that allow characterizing the nuclear structure evolution. However, to describe properly the spectroscopic properties one has to deal with methods that go beyond mean field approximation, such as restoration of broken symmetries with projection methods or configuration mixing within the generator coordinate method, which are very time consuming numerically. In this work we have exploited an alternative to those methods based on mappings to a Hamiltonian (IBM) written in terms of bosonic degrees of freedom that allows one to calculate easily spectroscopic properties. The model parameters are fitted to reproduce the microscopic surface energies as obtained from the selfconsistent HFB-Gogny method. In this way we recover the good properties of the microscopic methods, having at the same time the possibility to calculate spectroscopic properties. We applied this method to several regions including nuclei with masses $A=180-200$ and neutron-rich Krypton isotopes.

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

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

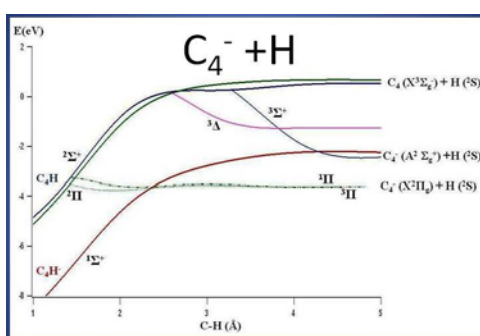
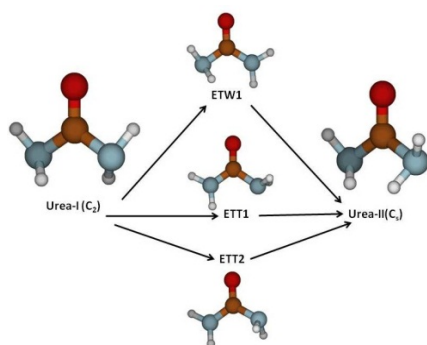
More specifically, during the last months our work has been focused in two main issues: The first one concerns the triple-alpha process and its reaction rate at very low temperatures. The fact that at such low temperatures the energies involved are far below the lowest 0^+ resonance in ^8Be implies that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

THEORETICAL PHYSICAL-CHEMISTRY APPLIED TO ASTROPHYSICS

During 2012, 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, ALMA and SOFIA 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 ($X = N, H$). 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 awakened in the astrophysical community, studying C_6^- and C_4H^- . We have identified isomeric structures, potential energy surfaces for the first electronic states, as well as rovibrational properties including anharmonic effects. We provide possible isomerization processes and predict Renner-Teller and rovibronic effects. A general rule to distinguish between detectable and undetectable anion has been derived from our studies concerning the C_nH^- anion formation processes.



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 and methyl acetate have 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 Paris-Est Créteil. Monosubstituted isotopic varieties of dimethyl-ether, methyl acetate and propane have been explored. Propane is an important molecule for the understanding of Titan atmosphere.

Finally, the collisional study of C_2H (anion and neutral) with ortho- H_2 and para- H_2 and He 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. Our papers display important results concerning the difference of anion and neutral species behaviours.

2B.2 DPTO DE ESPECTROSCOPIA NUCLEAR, VIBRACIONAL Y DE MATERIA DESORDENADA/ NUCLEAR, VIBRATIONAL AND DISORDERED MEDIA SPECTROSCOPY

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

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 break up 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.
- Laser Induced Breakdown Spectroscopy (LIBS).
- Surface-enhanced (SEVS) on metal nanostructures.
- Vibrational Spectroscopy applied to Cultural Heritage.
- SEVS applied to pollutant detection.
- Applications of SERS to biology: drug/biomolecule interaction.
- Plasmonics in metal nanostructures.
- Optical Metamaterials.
- Semiconductor Nanowire Photonics.
- Plasmon resonances on metal nanostructures (Nanoantennae): Raman and Fluorescence.
- Metamaterials in the optical range.
- Infrared Laser Induced Ablation Plasmas.
- Laser Induced Breakdown Spectroscopy in Laser Induced Plasmas.

EMPLOYED TECHNIQUES:

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

- Computational methods.
- Neutron Scattering.
- Calorimetric techniques.
- Absorption techniques.
- IR Spectroscopy (FTIR and SEIR).
- Raman Spectroscopy (FT, micro-Raman, Raman mapping, Raman imaging and SERS).
- Visible-UV Spectroscopy.
- IR and Raman Spectroscopy of two dimensional correlations 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.
- Theoretical Physics: Classical Electrodynamics.
- Laser Induced Breakdown Spectroscopy (LIBS).
- Laser Induced Fluorescence (LIF).
- Laser Physical Deposition (LPD).
- Portable techniques (Raman).
- Low field NMR relaxometry.

RESEARCH ACTIVITY:

CHARACTERIZATION OF NUCLEAR STATES AND RELEVANT REACTIONS IN STELLAR NUCLEO SYNTHESIS

Using $^{19}\text{F}(p,\alpha\gamma)^{16}\text{O}$ to populate α -unbound states in ^{16}O

Project EUROGENESIS EUROCORES-EUI-2009-04162. (Dra. contratada Ana Becerril)

We have performed a feasibility study for using the nuclear reaction $^{19}\text{F}(p,\alpha\gamma)^{16}\text{O}$ to determine the reduced α -widths of the states, relevant for the direct radiative capture reaction $^{12}\text{C}(\alpha, \gamma)^{16}\text{O}$.

The $^{19}\text{F}(p,\alpha\gamma)^{16}\text{O}$ reaction was investigated at *Centro de Micro Analisis de Materiales (CMAM)* at the *Universidad Autonoma de Madrid (UAM)*. A mono energetic proton beam in the energy- range between 800 and 3000 keV impinged upon a $120 \text{ g/cm}^2 \text{ MgF}_2$ target (with a $10 \text{ }\mu\text{g/cm}^2 \text{ }^{12}\text{C}$ backing). An array of highly segmented $\Delta E - E$ Silicon detectors was used to measure the energy and angle of the outgoing particles. This experimental setup covered forward angles in the range of 37 to 64 degrees, and from 115 to 156 degrees in the backward direction, which allowed for the detection of particles emitted back-to-back in coincidence. Therefore, the focus of the analysis is to identify two α particles plus (ideally) a ^{12}C recoil in coincidence. Of special interest are the alphas that populate the 2+ and 1- sub-threshold states in ^{16}O located at 6917 keV and 7116 keV respectively, which are considered to play a key role in the radiative capture process. Also, it is important to identify and eliminate random coincidences.

The $^{12}\text{C}(\alpha, \gamma)^{16}\text{O}$ reaction is of great importance for nuclear astrophysics due to its major role in determining the Carbon to Oxygen ratio during Helium burning in stars. Also, it influences the nucleosynthesis of all elements beyond $A = 16$ in later burning stages. A high number of studies have been dedicated to the investigation of the $^{12}\text{C}(\alpha, \gamma)^{16}\text{O}$ reaction, but its very low cross section (around 10^{-17} barn) at 300 keV, the relevant energy for He burning, has limited the knowledge of its rate. The use of the inverse reaction $^{19}\text{F}(p,\alpha\gamma)^{16}\text{O}$ for the indirect study of $^{12}\text{C}(\alpha, \gamma)^{16}\text{O}$, will allow for the determination of the reduced α -widths of the sub-threshold states in. The analysis of the data in order to optimize for a future experimental set-up is in progress.

DETERMINATION OF THE CROSS SECTION FOR THE REACTION $^4\text{He}(^3\text{He},\gamma)^7\text{Be}$

Project FPA2009-07387. (doctorando JAE-predocctoral M. Carmona-Gallardo)

During the last years, we have been studying the nuclear cross section of the $^4\text{He}(^3\text{He},\gamma)^7\text{Be}$ reaction. This reaction plays an important role in both the *Standard Solar Model*, as it is the second largest error contributor among the nuclear input parameters for determining the high energy solar neutrinos flux, and in the *Big Bang* nucleo-synthesis for resolving the primordial ^7Li abundance problem in the universe. This year the results from the experiment performed at CMAM were published (M. Carmona-Gallardo et al. PRC 86, 032801(R) (2012)). In this experiment we used the activation technique consisting in the detection of the subsequent gamma radiation coming from the de-excitation of the ^7Li after ^7Be disintegration. Our results solves the present discrepancies for medium energies, confirming e.g. the new ab-initio calculations by T. Neff (T. Neff, Phys. Rev. Lett. 106, 042502 (2011)).

In collaboration with the York University, in UK, the Weizmann Institute from Israel and TRIUMF in Canada, our group has performed a complementary experiment using the DRAGON spectrometer at TRIUMF. In this experiment, we are studying the cross section for the same reaction but now in inverse kinematics using an alternative technique consisting in the direct detection of the ^7Be -recoils in a DSSSD detector placed at the focal plane in the end of the spectrometer.

This experiment has extra difficulties due to the fact that we are using a windowless gas target, thus the target density profile has to be determined experimentally measuring the $^{12}\text{C}(^3\text{He},\gamma)$ reaction. Moreover the cone angle of the reaction is out of the geometrical acceptance of the spectrometer and we are performing simulations in order to determine the exact acceptance of DRAGON for this reaction for the same energies studied experimentally. The study of the cross section of this nuclear reaction using both experimental techniques is the thesis work of Mariano Carmona Gallardo, to be defended in 2013.

EXPERIMENT S393 R3B@GSI: NÚCLEOS RICOS EN NEUTRONES MÁS ALLÁ DE LA LÍNEA DE GOTEÓ.

Proyecto FPA2009-07387 (doctorando FPI2010 G. Ribeiro)

In the context of the international collaboration R3B, we have been studying radioactive beams accelerated to energies up to 490 MeV/u and let to impinge on a proton target (CH_2) in order to study nucleon transfer reactions producing a cocktail of very exotic light nuclei. The PhD student G.Ribeiro is involved in the analysis and focuses his thesis on the study of one the most exotic reaction channels, the ones of nuclei (or resonances) beyond the drip-line like the ^{13}Be or the ^{16}B that were produced in the experiment. This kind of nuclei are good probes for understanding the nuclear structure limits, the phenomena that appears here are not found in other regions of the nuclei chart, like the appearance of new magic numbers, halos or unbound states, that together allow for a better understanding of the interaction between nucleons inside the nuclei.

The unbound states of the nuclei beyond the dripline have a half-life in the range of nanoseconds, which makes impossible direct detection. This means that is necessary to have a kinematically complete measurement i.e. to detect and identify the incoming projectile as well as to follow the trajectory and determine the energy of all outgoing fragments. This kind of measurement requires an experimental setup with a big amount of detectors, which has been, calibrated the last year allowing now to focus in getting physics results along the 2013 year.

EXPERIMENT S1104: STUDY OF HALO EFFECTS IN THE SCATTERING OF ^{11}Li WITH HEAVY TARGETS AT ENERGIES AROUND THE COULOMB BARRIER

FPA2009-07387 (doctorando contratado Mario Cubero)

The first measurement of the elastic scattering of the halo nucleus ^{11}Li and its core ^9Li on ^{208}Pb at energies near the Coulomb barrier is presented. The $^{11}\text{Li} + ^{208}\text{Pb}$ elastic scattering shows a strong reduction with respect to the Rutherford cross section, even at energies well below the barrier and down to very small scattering angles. This drastic change of the elastic differential cross section observed in $^{11}\text{Li} + ^{208}\text{Pb}$ is the consequence of the halo structure of ^{11}Li , as it is not observed in the elastic scattering of its core ^9Li at the same energies. Four-body continuum-discretized coupled-channels calculations, based on a three-body model of the ^{11}Li projectile, are found to explain the measured angular distributions and confirm that the observed reduction is mainly due to the strong Coulomb coupling to the dipole states in the low-lying continuum of ^{11}Li . These calculations suggest the presence of a low-lying dipole resonance in ^{11}Li close to the breakup threshold. This work forms the bases of the thesis of Mario Cubero that he excellently defended 22nd of December 2012.

EXPERIMENTO S1202: EXPLORING HALO EFFECTS IN THE SCATTERING OF ^{11}Be ON HEAVY TARGETS

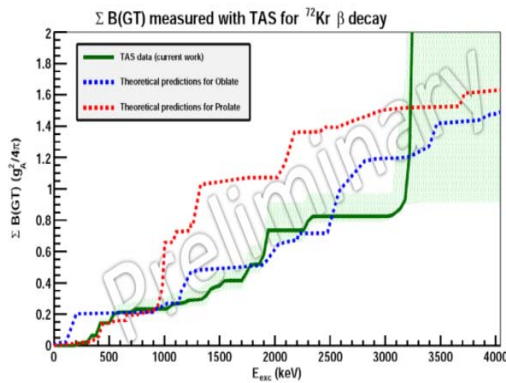
FPA2009-07387 (doctorando contratado Vicente Pesudo)

We have started the study of the 1n-halo nucleus ^{11}Be . A halo nucleus is characterized by, instead of having a homogeneous density as most, be made up of a compact core and having one or two nucleons with a wavelength that is extended up to higher radius, what entails that the volume of the halo nuclei is much greater than the volume of other nuclei with the same mass number and their surface is dim. In the case of ^{11}Be halo is formed by a single neutron. Compared to ^{11}Li , which is the other halo nucleus studied by our group (experiment S1104) that has a two neutron halo, ^{11}Be presents some added difficulties, but also some remarkable aspects. It has a lower binding energy and a low-energy excited state, what complicates the production of the isotope and the study of the effect purely produced by the halo structure, respectively. Despite that, the one-neutron halo is a unique scenario that allows us to study how the core interacts with a single neutron. We have from the data obtained so far determined the break up probability of the nucleus when it interacts in a ^{208}Pb -target at energies around the Coulomb barrier and we are now beginning the study of the elastic and inelastic scattering.

STUDY OF THE DEFORMATION OF THE N=Z NUCLEUS ^{72}Kr VIA BETA DECAY
Project FPA2009-07387 (doctorando FPI2008 J. Briz Monago)

The Total Absorption Spectroscopy technique (TAS) allows us to experimentally measure the beta feeding distribution as a function of the excitation energy in the daughter nucleus and, from this deduce the Gamow-Teller strength distribution. An interesting application of this technique is the study of the decay of exotic nuclei with $N=Z$ in the mass region $A=40-100$. Nuclei in this region are expected to show strong shape transitions from spherical to oblate, prolate and spherical again while moving along $N=Z$ line from $A=40$ up to $A=100$. Furthermore, theoretical calculations for $N=Z$ nuclei around $A=70-80$ predict very different Gamow-Teller strength distributions for different deformations of the ground state of the parent nucleus. Thus, the comparison of the experimental distribution with the theoretical prediction for the different deformations can shed light on the state of deformation of these nuclei.

The beta decay of the $N=Z$ nucleus ^{72}Kr was studied at ISOLDE (CERN) with the “Lucrecia” Total Absorption Spectrometer. The analysis of these data has been performed obtaining as results, among others, the beta feeding distribution and, from this, the Gamow-Teller strength distribution along the full Q_β energy window accessible in the ^{72}Kr β^+/EC decay. These experimental results are compared with the theoretical calculations performed by Pedro Sarriguren (Departamento de Química y Física Teóricas, IEM) with the self-consistent Hartree-Fock plus Random Phase Approximation (RPA) method using Skyrme forces. As we have stated before, these calculations predict very different Gamow-Teller strength distributions for the case of oblate (mandarine-like shape) and prolate (egg-like shape) deformations. Thus, one can extract conclusions on the type of deformation exhibits by the ^{72}Kr nucleus.



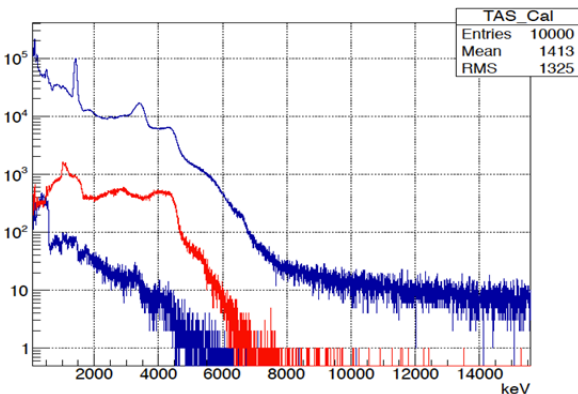
Cumulated B(GT) Gamow-Teller strength distribution of the β^+/EC decay of ^{72}Kr as a function of the excitation energy in the daughter nucleus, ^{72}Br . In green is presented the experimental result obtained with the TAS technique. The theoretical predictions for oblate shape are shown by dashed line in blue and for prolate deformation in red.

The preliminary experimental results obtained in this work are shown in the figure. The experimental distribution of the cumulated B(GT) favors the prediction of oblate deformation of the ground state of ^{72}Kr .

This work, in addition with the study of the low-spin structure of the daughter nucleus of the beta decay of ^{72}Kr , i.e. ^{72}Br , through the conversion electron spectroscopy, will be the main part of the Ph.D. thesis of the student José Antonio Briz (FPI fellowship student) that will be defended in mid-2013.

NUCLEAR DEFORMATION IN THE VICINITY OF Z=82: BETA DECAY OF ^{182,184,186}Hg
Proyecto FPA2009-07387 (Dr. E. Náchter)

Neutron-deficient Hg nuclei have been the subject of intensive experimental and theoretical research since the 1970s. The main reason for this interest is the existence of coexisting shape structures at low excitation energies in some of the even isotopes and shape changes in the ground states of the odd ones. Actually, the first direct evidence for shape coexistence near the Z=82 shell closure was obtained for neutron-deficient mercury isotopes by means of isotope shift measurements. Those measurements revealed drastic shape changes between the ground states of the odd-mass ^{185,187}Hg isotopes. In the vicinity of the Z=82 region, theoretical calculations predict that the Gamow-Teller strength distributions of the ¹⁸⁴⁻¹⁹⁴Pb and ¹⁸⁰⁻¹⁹²Hg isotopes show clearly differing patterns depending on the assumed deformation of the parent state. This feature can be exploited to study the shape co-existence phenomenon if the theoretical results are combined with precise measurements of the B(GT) in the decay of these nuclei using the total absorption technique. In a broader context, precise measurements of the B(GT) are also important to test nuclear models further in the Z=82 region.



For the study of the beta-decay of ^{182,184,186}Hg we have used the Total Absorption Spectrometer *Lucrecia*, described in the previous report. The experiment was performed at the beginning of December 2012 at the ISOLDE-CERN facility, where a thick target of molten Pb was bombarded with 1.4 GeV protons from the PS-Booster accelerator. In the figure we can see the decay spectrum of ¹⁸²Hg measured without coincidences (higher blue) and with coincidences with X-rays (middle red) and with beta particles (lower blue). During the next months we will analyze these data to infer the shape of the ground state of the light Hg isotopes.

GANAS GAMMA DETECTION USING NEW AND ADVANZED SCINTILLATORS.
Project ERANET NupNET PRI-PIMNUP-2011-1333, (Dr. José Sánchez del Río)

During this period scintillator materials like LaBr₃ and LaCl₃ have been experimentally studied to be used like high energy charged particles and gamma radiation detectors for nuclear physics experiments in medium and big European accelerators facilities. Novel techniques of data proocess and data analysis have been developed using the electronics characteristic to the experiment. At the same time, complex electronic set-ups in real time for such fast processing methods have been developed so that we are able to save the experimental data in real time for its following study.

Montecarlo Simualtions have been performed with programs like Gean4 or R3BRoot the same as experimental tests in GSI (Darmstad, Germany) or in CMAM (Madrid) with fast and high efficient scintillator materials detectors in phoswich configuration (LaBr₃ and LaCl₃). The detectors used have 2 different geometries: one of them a pyramidal truncated with sides of 50 cm of radius, energy reolution of 3.75 % and angular resolution of 2.5°. The other one is a planar array of 2x2 phoswich crystals and have 4 cm of LaBr₃ lenth and 6 cm of LaCl₃, optically coupled together. In the superior bases of the LaCl₃ crystals 8 stages HAMAMATASU R5380 PMs are optically coupled to the LaCl₃ crystals. These have been designed and developed as a first step towards the construction of the forward part of the calorimeter (CEPA).

Once the detectors were calibrated, the phoswich planar array was used in CMAM (April-May, 2002) to detect the high energy gamma radiation (up to 7 MeV), making use of the nuclear experiment ¹⁹F(p,αγ)¹⁶O mentioned earlier in this report. The detector was also used in the S406 experiment (Beam test: September, 2012, experiment date: October 2012) in which proton beams and high energy neutrons were used (200 - 1500 MeV) to test the performance of the different detectors that operate in the experimental setup of the R3B and others from external groups like our 2x2 phoswich crystals array. The experimental set-up (DAQ, data recording and storage, etc.) for the CEPA detector is being developed independently by IEM for the direct digitalization of the dynode signals in order to be able to separate the information independently from each crystal of the Phoswich.

DEVELOPMENT OF AN EXOTIC BEAM OF ^{31}Mg FOR ISOLDE AND HIE-ISOLDE
Project FPA2009-07387 (Dr. contratado A. Gottberg)

The doctor Alexander Gottberg, paid by the project FPA2009-07387 is working in novel developments for the production of radioactive beams at ISOLDE facility and the future facility HIE-ISOLDE. Dr. Gottberg is in this project in charge of the development of a target to produce the isotope ^{31}Mg , see the link.
<http://www.iem.csic.es/departamentos/nuclear/fnexp/noticias/Gottberg-CERN-Bulletin.pdf>

TRAINING OF A TECHNICIAN IN THE AREA OF EUROPEAN FACILITIES
Project MICINN EIC-CERN-2011-0022 (R. Lorenzo Ortega)

Rubén Lorenzo Ortega, paid by the ministry of Economy and Competitivity with the project EIC-CERN-2011-0022 (IP MJ Garcia Borge/O. Tengblad), is covering the position for the training of a technician in the area of European International Research Facilities. He is working in new developments and improvements for the transport of the CERN PS accelerator beam. The project for which Ruben Lorenzo is working is based on the replacement of the motors of the PS accelerator *Kickers* for new, with the idea of taking advantage of the advances achieved over the years of use. Presently the old servo-motors produce vibrations when the mechanism is used for changing the *Kicker* position.

MAGNETIC MOMENT MEASUREMENT WITH EXOTIC THE NEUTRON RICH ION BEAMS (REX-ISOLDE)
FPA2009-13377-C02-02 and FPA2011-29854-C04-01 A. Illana

Magnetic moments are a sensitive probe of single-particle properties in nuclei. They can be measured by observing the perturbation introduced by a magnetic field on the angular correlation of gamma rays emitted in the de-excitation of the nuclear state of interest. Magnetic moment measurements were of paramount importance in the development of nuclear structure, and they were and are still essential to test the predictive power of the nuclear shell model. This technique has successfully been employed for many years to measure magnetic moments with stables beams, and extending the investigation to exotic beams has been the aim of our group.

At the end of 2011 A. Jungclaus, A. Illana, A. Perea, J. A. Briz and R. Orlandi, in collaboration with researchers from other European research institutes, carried out the experiment IS483 at REX-ISOLDE, CERN, aiming for the

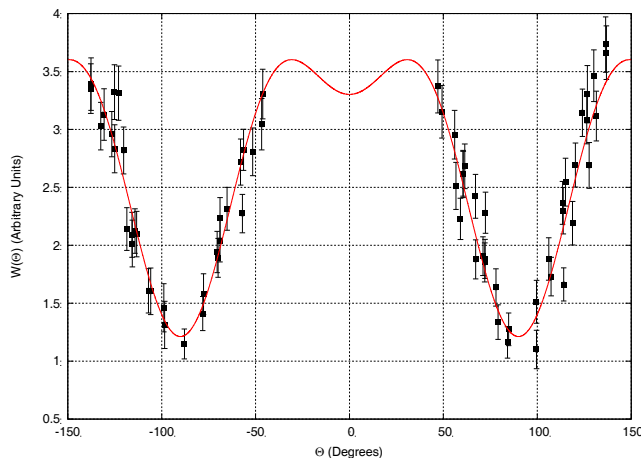


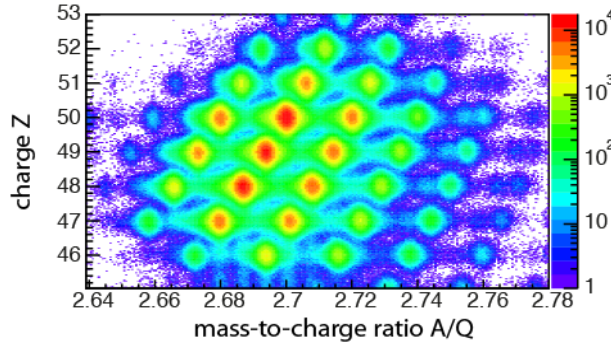
Figure: Angular correlation of the γ -ray depopulating the 2^+ state in ^{72}Zn . The experimental data are presented as black dots while the red line is the fit of the function $W(\theta)$.

measurement of the magnetic moment of the first excited 2^+ state in ^{72}Zn . This experiment was performed employing a new reaction chamber, which was developed and built at IEM-CSIC. The data of the experiment are currently being analysed by A. Illana in the frame of his PhD thesis. The figure shows a preliminary result the angular correlation of the gamma ray depopulating the 2^+ state in ^{72}Zn . The analysis of the experiment right now is close to be finished. This measurement will allow us to test the modern large-scale shell model calculations, which best describe this region of the nuclear chart.

STUDY OF EXOTIC NUCLEI CLOSE TO THE DOUBLY MAGIC ^{132}Sn USING THE METHOD OF DECAY SPECTROSCOPY (EURICA@RIKEN)
FPA2009-13377-C02-02 and FPA2011-29854-C04-01 J. Trapogge

In the context of the international collaboration EURICA studies have been carried out investigating exotic nuclei around the neutron-rich spherical nucleus ^{132}Sn by using the methods of isomer and decay spectroscopy. This region is on the one hand important for testing the nuclear shell model and the results could serve as input for any reliable future microscopic nuclear-structure calculations towards the neutron drip line. And on the other hand this region is relevant for nuclear astrophysics, especially for nucleosynthesis calculations.

The exotic nuclei were produced at the accelerator facility in RIKEN (Japan) in the fission of a ^{238}U primary beam at 345 MeV/u on a Be target. The nuclei were separated and identified on an event-by-event basis using the fragment separator BigRIPS and stopped at the final focal plane of the Zero-Degree-Spectrometer in the active stopper WASABI. The figure shows the identification plot of the nuclei produced in this experiment. The nuclei of main interest are ^{132}Cd and $^{136/138}\text{Sn}$. WASABI, consisting of 8 DSSD (each with a dimension of 60x40mm and a segmentation in 60+40 strips), was surrounded by 12 EUROBALL germanium cluster detectors for the detection of the γ -rays emitted in the decay of isomeric states and after the β -decays of the produced nuclei. The data of this experiment, which took place in December 2012, are currently being analyzed by J. Taprogge in the framework of his PhD thesis.



Identification plot of the exotic nuclei produced in the RIBF-85 experiment. The mass-to-charge ratio is calculated from the time-of-flight through BigRIPS using several correction factors like the position at the different focal planes. The nuclear charge Z of the nuclei is deduced from the energy loss in an ionization chamber.

EXPERIMENTS IS524 AND IS510: COULOMB EXCITATION OF NEUTRON-RICH CD AND ZN ISOTOPES AT REX-ISOLDE

[FPA2009-13377-C02-02](#) and [FPA2011-29854-C04-01](#)

With experiment IS524 we continued our study of the neutron-rich Cd isotopes towards the $N=82$ shell closure using Coulomb excitation at safe energies. In the past radioactive beams of the even Cd isotopes $^{124,126,128}\text{Cd}$ were used and it was shown that these nuclei may possess some collectivity beyond that calculated by modern shell-model predictions. Beyond mean field calculations also predict these nuclei to be weakly deformed. These facets are surprising considering their proximity to the doubly magic ^{132}Sn . We extended these Coulomb-excitation studies now to the odd- A Cd isotopes which may give a unique insight into the deformation-driving role played by different shell model orbitals in this region. Such studies of the onset of collectivity become especially important in light of recent results showing that mid-shell Cd nuclei can no longer be classified as vibrational in nature.

In experiment IS510 the nucleus ^{72}Zn , 2 protons and 2 neutrons away from the possible double-magic ^{68}Ni , has been studied by means of Coulomb excitation in inverse kinematics. Current data suggest almost degenerated 2^+ states of 2-phonon and mixed-symmetric character, respectively. The identification of the 2^+ ms state in ^{72}Zn will be a direct measure of the interaction between valence protons and neutrons which is the key to an understanding of the nature of ^{68}Ni . This experiment is expected to give complementary information to our recent g factor measurement in ^{72}Zn (see above).

EXPERIMENTS S428, S428 AND S433: COULOMB EXCITATION AT RELATIVISTIC ENERGIES WITHIN THE PRESPEC CAMPAIGN AT GSI

[FPA2009-13377-C02-02](#) and [FPA2011-29854-C04-01](#)

The PRESPEC campaign at GSI is a precursor of the project HISPEC at the future FAIR facility. In PRESPEC the first stage of the european AGATA gamma-ray tracking array (about twenty 36-fold segmented Ge crystals) is used in combination with the fragment recoil separator FRS and the charged particle detector array LYCCA-0 to perform in-beam gamma-ray spectroscopy at relativistic energies, mainly using Coulomb excitation and knockout reactions to populate the excited states of interest in exotic atomic nuclei produced in either projectile fission or fragmentation. We were collaborating in the first series of PRESPEC experiments in 2012 dedicated to the study of neutron-rich Zr, Nb, Mo, Os, Pt and Hg isotopes. In addition a very challenging study of neutron-deficient ^{52}Fe has been performed trying to Coulomb excite Fe ions in a short-lived isomeric 12^+ state in order to gain inside into the structure of this nucleus at high angular momentum above the known isomer.

EXPERIMENTS NP1106-RIBF74 AND NP0811-RIBF70R1: IN-BEAM GAMMA-RAY SPECTROSCOPY WITH THE DALI2 SPECTROMETER AT RIKEN

[FPA2009-13377-C02-02](#) and [FPA2011-29854-C04-01](#)

The experiments NP1106-RIBF74 AND NP0811-RIBF70R1 have been performed to study the neutron-deficient semi-magic nucleus ^{104}Sn only four neutrons away from the doubly-magic cornerstone ^{100}Sn . Prior to this experiment it was found that the evolution of the reduced transition probability from the ground to the first excited

2^+ states within the neutron-deficient Sn isotopes shows an unexpected enhancement towards the N=50 shell closure. In order to understand the underlying mechanisms for this enhancement, we performed a Coulomb excitation measurement at intermediate energies using the DALI2 spectrometer and a ^{104}Sn beam delivered by the BigRIPS spectrometer. In the same experiment, a second Sn isotope with known transition strength, namely the stable isotope ^{112}Sn , was studied, too, in order to extract the nuclear excitation contributions from absolute cross-section measurements.

EXPERIMENTS NP1112-RIBF83, NP0702-RIBF10, RIBF60&62R1 AND NP1112-RIBF85: DECAY SPECTROSCOPY WITHIN THE EURICA PROJECT AT RIKEN

FPA2009-13377-C02-02 and FPA2011-29854-C04-01

Last year the EURICA (Euroball-RIKEN Cluster Array) project started operation at the Radioactive Beam Factory (RIBF) at RIKEN (Japan). Within this project twelve large volume Ge cluster detectors, which previously had been employed by the European nuclear structure community (including the group at IEM) both as part of the EUROBALL 4 π gamma-ray spectrometer as well as afterwards in the RISING project at GSI, have been shipped to and installed at the RIBF facility at RIKEN. The idea behind is to take advantage of the unrivalled yields of exotic radioactive beams, provided by the accelerator complex at RIKEN combined to the BigRIPS fragment separator, to perform decay spectroscopy (both isomeric states and beta-decay) in regions of the nuclidic chart which have never been accessible to such type of studies before. We actively contributed to the installation of the setup and participated in the first experimental campaign dedicated to the study of neutron-rich isotopes in the regions around the doubly-magic nuclei ^{78}Ni , ^{100}Sn and ^{132}Sn . The experiment NP1112-IBF85, which was lead by our group together with colleagues from the LPSC Grenoble (France), is described in more detail below. It will form the basis of the PhD work of Jan Taprogge.

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 weak (dispersive) interactions, i.e., interactions comparable to those acting between the molecules themselves so that there is not a breakdown of the chemical molecular bond (chemisorption), it is not possible to retain a substantial quantity of molecules on the adsorbent substrate.

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

During 2012 our research efforts has been focused on the numerical simulation of some of these adsorption microscopic mechanisms as well as in the experimental estudy of the intercalation of simple molecules within graphite oxide (propanol, aniline, etc). From the practical point of view, here the rational is the possibility of tuning the interlayer space as well as the tortuosity of the final nanostructured materials.

Finally, we have finished during 2012 the experimental estudy of the molecular hydrogen crystal by means of a combination of neutron scattering and numerical techniques. The picture that emerges of this fundamental cryocrystal is that of a fully quantum system were quantum delocalizacion leads to a fully expanded crystal (in the verge of melting) whatever the temperature (see Physical Review B 85, 014026 (2012)).

ADVANCED INSTRUMENTATION DEVELOPMENT FOR NEUTRON SOURCES

In recent years much of the work in this area developed by the group has been focused on the Spanish candidature to the European Spallation Neutron Source (ESS-Bilbao). Within this respect, on May 2009 an inflexion point was reached after an informal agreement in Bruxels in favor of the Swedish site proposal (Lund) and the subsequent agreement between the Spanish Science and Innovation Ministry and the relevant Swedish. As a consequence the ESS-Bilbao Consortium (Central Administration / Basque Country Government) has refocused its activities 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).

During 2012 the developed and planned activities in ESS-Bilbao consortium were submitted to scrutiny by an Official International Scientific Advisory Committee receiving excellent reviews. Also, the design of the possible neutron targets has reaching the final phase. The results have far exceeded the expectations of the initial specifications. In this regard it should be also notice that since 2011 the collaboration with ESS-Lund entered a new phase aiming to the final design of the neutron target of the future European Spallation Source.

IR LASER INDUCED BREAKDOWN SPECTROSCOPY (LIBS)

A review of some fundamentals of LIBS and some experimental studies developed in our laboratory on gases such as He, GeH₄ and CO₂, has been done as a book chapter. The physical processes leading to laser-induced breakdown of gases have been analyzed. Optical breakdown threshold intensities in different gases have been experimentally measured. Excitation temperatures and electron number densities are estimated from the intensities and the Stark broadening of several ionic lines. The velocity and kinetic energy distributions for the different species were obtained from time-of-flight (TOF) OES measurements. Temporal evolution of electron density has been used for the estimation of the three-body recombination rate constant.

SPECTROSCOPY IN INFRARED LASER INDUCED ABLATION PLASMAS

Laser-Induced Breakdown Spectroscopy (LIBS) of ablation plumes of DNA bases Guanine and Adenine has been study using a high-power CO₂ pulsed laser. We have found that the strong emission of the adenine and guanine plasma collected using a high-resolution spectrometer, at medium-vacuum conditions (4 Pa), exhibits excited molecular bands of CN ($B^2\Sigma^+-X^2\Sigma^+$) and excited neutral H and ionized N⁺ and C⁺. The medium-weak emission is due to excited species C²⁺, C³⁺, N, O, O⁺ and molecular band systems of C₂($d^3\Pi_g-a^3\Pi_u$; $D^1\Sigma_u^+-X^1\Sigma_g^+$), OH($A^2\Sigma^+-X^2\Pi$), NH($A^3\Pi-X^3\Sigma^-$), CH($A^2\Delta-X^2\Pi$), N₂⁺($B^2\Sigma_u^+-X^2\Sigma_g^+$) and N₂($C^3\Pi_u-B^3\Pi_g$). We focus our attention on the temporal evolution of different atomic/ionic and molecular species. The velocity distributions for various (different) species were obtained from time-of-flight (TOF) measurements. Intensities of some lines from C⁺ were used for determining electron temperature and their Stark-broadened profiles were employed to estimate the temporal evolution of electron density. Optical breakdown threshold intensities in Adenine and Guanine molecules have been also measured.

We have studied the time-resolved laser induced breakdown spectroscopy (LIBS) of plasmas induced by nanosecond laser pulses ablation of titanium oxides TiO and TiO₂ (Anatase phase) at medium vacuum. The excitation was performed using a nanosecond IR CO₂ laser. The laser-induced plasma was found strongly ionized in Ti⁺, O⁺, Ti²⁺, O²⁺, Ti³⁺, and Ti⁴⁺ species and rich in neutral titanium and oxygen atoms. The temporal behavior of specific emission lines of Ti, Ti⁺, Ti²⁺ and Ti³⁺ has been characterized. The results show a faster decay of Ti³⁺ and Ti²⁺ ionic species than in the case of Ti⁺ and neutral Ti atoms. The velocity distributions for atomic and ionic species are obtained from time-of-flight measurements. Spectroscopic diagnostics were used to determine the time-resolved electron density and excitation temperatures. IR laser irradiation of TiO₂-anatase induces in the surface sample polymorphic transformation to TiO₂-rutile. The dependence on fluence and number of irradiation pulses of this transformation was studied by micro-Raman spectroscopy. A clear incubation effect is observed in the case of CO₂ laser irradiation, this transformation is similar for 10 pulses at fluence just above the threshold fluence (F_{th}) than for one pulse with fluence 40 times higher than F_{th} .

We have collaborated with the Dra. S. Martinez, from the group of Optical Spectroscopies on Plasmon Metal Nanostructures of this Department, in obtaining synthetic glasses by using laser technologies as described in another section of this Memory.

These works have been done in collaboration with Profs. J.J. Camacho and J.M. Poyato (Physical-Chemistry Department of UAM), M. Sanz y M. Castillejo (IQFR) and the participation of Dra. Věra Jandová (Institute Chemical Processes Fundamentals of Czech Republic).

NANOFABRICATION

The nanofabrication work has continued on the manufacture of nanoparticles (NPs) with metallic plasmonic properties, displaying advanced spectroscopic applications. The main purpose of this task was the fabrication of nanoscopic systems leading to high electromagnetic field intensifications. The strategy for obtaining these systems has been two-fold: a) The preparation of anisotropic NPs with special morphologies leading to high field enhancement, as triangular nanoprisms and nanostars, and b) the association of spherical nanoparticles by using bifunctional molecules leading to interparticle cavities highly effective in enhancing Raman scattering (hot spots). Progress has been made in a very special way to develop protocols for the preparation of silver nano-shaped nanoparticles, which were not prepared so far in silver. These nanoparticles have a larger number of advantages in relation to gold, since Ag is more efficient in SERS, because of the greater enhancement factor, and because of their wider range of activity, as the AgNPs exhibit plasmon resonances in the visible spectrum and the near-infrared. In addition, the protocols of preparation of Ag nanostars were aimed at avoiding the use of surfactants, which are normally used in the preparation of Au nanostars, since these substances prevent the approach of the analyte to the surface, thus decreasing the efficiency of these systems in spectroscopy. Moreover, the assembly of NPs was conducted by using bifunctional molecules such as diamines, dithiols (both aliphatic and aromatic ones) and aromatic phenyl diisocyanides with variable lengths. The characterization of these systems has been accomplished by plasmon resonance, TEM, SERS and SEF.

SURFACE FUNCTIONALIZATION: FABRICATION OF NANOSENSORS

The functionalization of metal surfaces obtained by self-assembly of organic molecules has also been a significant line for our group in 2012. The functionalization can highly increase the sensitivity and selectivity of the fabricated nanostructures, resulting in high performance surfaces by combining the physical properties of the obtained metal with the chemical properties of organic molecules self-assembled on them. Moreover, these molecules may increase the biocompatibility of plasmonic metal NPs, which is an issue of great interest in medical applications, and may allow the control of the self-assembly of these systems.

The functionalization of NPs with modified cyclodextrins dithiocarbamate (DTC) has been successfully completed this year. These systems have enabled the detection of sport doping molecules, specifically nandrolone, until micromolar concentrations. These results have led to a patent application in state. Other functionalization molecules that have been used in the last year are cucurbiturils, which are molecules that work as inclusion assemblers. These molecules also exhibit a hosting activity, like cyclodextrins, since they bear a hydrophobic internal cavity within which molecules difficult to be detected by SERS can be hosted. The electron donor ability of these compounds has allowed its use for viologen pesticide detection and study of its dimerization within the internal cavity.

Finally, the functionalization of NPs was also carried out by using aliphatic dithiols. These bifunctional molecules perform a double function: a) the nanoparticle coupling with formation of interparticle junctions where a large intensification of the field occurs, and b) the creation of intermolecular cavities that allow the assembly of analytes. The detection of analytes is then possible because then they are concentrated in the interparticle cavities where a large intensification of the field is achieved. This method has been applied to the detection of organochlorine pesticides like endosulfan, aldrin and lindane. These studies were performed in the frame of the cooperation that our group maintains with from PJ Safarik University in Kosice (Slovakia).

During the last year it has also launched a new line of research that aims to make the functionalization of NPs with diisocyanides and related molecules, in order to implement these systems in catalytic processes of industrial interest. This line is being developed in collaboration with researchers at the University of Hokkaido in Sapporo (Japan).

BIOMOLECULE/NANOPARTICLE INTERACTION

The interaction of biological molecules with metal nanoparticles of Ag and Au was studied in depth during the last year. This study was also directed in part to carry out the functionalization of NPs with biomolecules to confer greater biocompatibility. Most of these investigations have been performed as collaboration between our group and researchers at the University of Paris XIII (France). In fact, it was conducted a study of interaction of sulfur-containing amino acids (cysteine and cystine) aimed at studying the stability of S-S bond in the presence of Ag and Au surfaces. Also in the frame of this collaboration, we have started the study of peptides of pharmacological interest, such as somatostatin, on plasmonic NPs for analytical purposes.

During this period, another very interesting peptide which has been studied was β -amyloid. This peptide is related to the development of Alzheimer's disease. In this regard, it has been conducted an investigation to characterize the dye Thioflavine by vibrational spectroscopy (IR, Raman, SERS) and SEF. This dye is able to interact with β -amyloid allowing its detection and that of related peptides at trace concentrations, thus allowing the early detection of this disease.

Within this line of research, we have continued with the study of the adsorption of proteins (human and bovine albumin and myoglobin, an important protein involved in the transport and storage of oxygen in muscle) on metals. This work was done in collaboration with researchers from the University of Florence (Italy).

The last year, we continued the research dealing with the structural analysis of biological materials difficult to characterize by conventional spectroscopic techniques. In this sense, we have carried out a structural and dynamical investigation upon polyphenolic substances extracted from the humic substances and from melanins produced by the digestion processes of fungi. In particular, we have conducted a SERS / SEF study of humic substances of different origin (soil, leonardite and lignite) on NPs of different morphology, developing strategies to increase the intensification of the fluorescence and Raman on metal surfaces. In this regard, it was carried out the functionalization of the surfaces with aliphatic diamines to increase the signal from the above polyphenolic molecules. These studies were performed in collaboration with researchers from the Universities of Bologna (Italy).

Also, in collaboration with the Department of Biophysics of the University PJ Safarik in Kosice in Slovakia, we have developed the structural characterization of natural anthraquinonic molecules with potential antitumor properties using SERS technique. This study was specifically focused on parietin pigment, present in the lichen *Xanthoria parietina* species. Furthermore, an analysis of the distribution of the pigment in the leaves of these lichens was carried out by Raman imaging techniques.

On the other side, in collaboration with Prof. Alessandro Feiss of the University of Florence (Italy), we have performed a kinetic study of the denaturation of myoglobine in the adsorption on the metal nanoparticle surfaces and their aggregation. These two processes occur simultaneously and both are dependent on the protein concentration and on the pH conditions. Their knowledge constitutes a principal step in determining the physicochemical conditions for obtaining SERS of the protein.

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

SEF spectroscopy has been used to characterized drug nanocarriers, either one step systems, composed by silver nanoparticles with the drug adsorbed on their surface or multi-stage systems composed by silver nanoparticles with the drug adsorbed on their surface and loaded on porous silicon. Molecules studied were the non-steroidal and antiinflammatory drugs ketorolac, indomethacin and piroxicam and the antitumoral emodin.

In the case of ketorolac, indomethacin and piroxicam, by using SEF together with SERS, we have carried out a molecular characterization of the drugs adsorbed on the metal surface. Several pHs have been used in order to simulate in vivo conditions. In the case of the antitumoral drug emodin, and as an extension of our previous experience, we have used SEF to characterize the drug adsorbed on nanoparticle surface and loaded on porous silicon. We have tested several colloidal suspensions and infiltration methods jointly with the influence of plasma proteins in order to establish the best conditions to carry the drug. Some release experiments have also been performed in order to study drug binding competitions between silver nanoparticles and serum proteins.

NANOSENSORS BASED ON SERS FOR DETECTION OF DRUGS USED IN SPORT DOPING

During the last year, interesting results concerning the application of the SERS technique for the characterization and detection of drugs used in sports doping were obtained. These studies have been focused on the drug aminoglutethimide (AGI), aromatase inhibitor used in athletes to prevent loss of muscle mass and probenecid (PB), masking agent used to mask the use of other anabolic agents. We have developed a method for the detection of these substances based on the use of nanoparticles with triangular prism shape. This study has permitted to obtain calibration straight lines, from which it was possible to deduce structural parameters of these important molecules such as the adsorption constant, the detection limit, the SERS enhancement factor and the maximum signal measurable by SERS.

Additionally, as mentioned above, nandrolone dopant was also detected by using Ag nanoparticles functionalised with cyclodextrin dithiocarbamate host molecules. All these results were part of the doctoral thesis of Irene Lorenzo Izquierdo, who defended his thesis in July 2012.

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

This line of research has continued with the implementation of the SEF and SERS spectroscopy to the study of synthetic organic pigments of high performance, which led to the doctoral thesis of Elena del Puerto, defended in May 2012. The pigments studied in this work were several quinacridone derivatives, known for their durability, partly due to its high insolubility in aqueous media, what makes very difficult to address their characterization by spectroscopic techniques. To accomplish this, we have firstly determined the optimal conditions for carrying out the dispersion of these molecules. During the last year alternative methods of dispersion of these substances were tested based on the use of ionic liquids (in particular, tetrabutylammonium nitrate and 1,3-butylmethylimidazolium), which induce the dispersion of these compounds and their adsorption on metal surfaces electrodes to be detected by SERS.

The work consisting in the application of Raman spectroscopy and SERS technique to the study of pigments employed in ancient Islamic manuscripts from Morocco was highly advanced. The use of Ag nanoparticles applied on certain areas of coloured inks of the manuscripts and the employ of confocal Raman, allowing an increase of the spatial resolution of the measurements, have revealed the presence of anthraquinone pigments in these manuscripts. Thanks to the obtained SERS spectra, it was possible to identify the presence of carmine in pink red inks as well as in areas containing black inks with red shade. This work was carried out thanks to a bilateral CSIC-CNRST collaboration project with researchers from the University Moulay Ismail in Meknes in Morocco.

We have continued with the characterization of traditional and commercial organic molecular additives employed in building materials of interest in Historical Heritage. Regarding the commercial additives, they are highly fluorescent organic compounds that are added in low proportions to the cement paste. This makes necessary the employ of the SERS technique for its detection in cement samples.

During this year, the SERS study of a third generation superplasticizer additive has been carried out. The main objective is the determination of the optimal experimental conditions (concentration, pH, excitation laser and type of metallic nanoparticles) for the detection of the superplasticizer by means of the SERS technique.

In collaboration with the “Departamento de Construcciones Arquitectónicas (Universidad Politécnica de Cataluña)”, the carbonation of a ternary cement system was studied, and the formation of a hydrated calcium sulphate carbonate phase of amorphous structure was identified by Raman spectroscopy.

The main objective of the PhD of Isabel Sáez was to improve and enlarge on the current understanding of C-S-H gel nanostructure. Particularly the effect of anhydrous phase composition, nanosilica, reaction time and temperature on the characteristics of C-S-H gels obtained in Portland cement hydration. The nanosilica encourages the formation of C-S-H gels with a lower Ca/Si ratio and delays the formation of jennite type structures at 25°C and 40°C while at 65°C tobermorite like structure formation was favoured.

Old building materials from the Cultural Heritage were made with puzzolanic mortars and some studies regarding the possible metastable phases formation is unclear. In collaboration with the Eduardo Torroja Institute for Construction Science (CSIC) the conversion reaction of metastable phases at long reaction time was studied by spectroscopic techniques. It was observed that at 34 and 123 days, a predominance of the stable cubic phase (hydrogarnet) over the metastable hexagonal phases. This fact could be indicating the first evidences of a possible conversion reaction.

The use of a portable Raman to detect the existence of conservation treatments (ethylmethacrylate copolymer and an ethyl orthosilicate), both as supplied and after application to limestone was studied in cooperation with the Instituto de Geociencias (CSIC).

Finally, we have also conducted a work is in collaboration with the group of Ablation Plasma Spectroscopy and Photodissociation obtain synthetic glasses in building materials silicon base by applying continuous and pulsed lasers and subsequent identification by laser ablation techniques (LIBS) Raman and Imaging. The results show that irradiating with continuous CO₂ lasers glasses materials are generated, the high temperature (4000-5000K) bearing a changes in the microstructure of the glasses.

SERS SPECTROSCOPIC STUDY OF THE ADSORPTION OF NEONICOTINOIDS INSECTICIDES

The vibrational study of the insecticide thiacloprid by SERS spectroscopy has been carried out. The optimal conditions for the detection of this insecticide in different experimental conditions (excitation wavelength, metallic nanoparticles and analite concentration) were detected. Firstly, the structural characterization of the molecule was performed aided by computational chemistry techniques. The structure of 4 possible thiacloprid conformers was

studied. Different geometries of the molecule on the surface were studied depending on the diverse conditions. This work was performed in collaboration with Prof. Alessandro Feis, from the University of Florence.

DESIGN OF A MICROFLUIDIC DEVICE TO USE WITH SERS SPECTROSCOPY

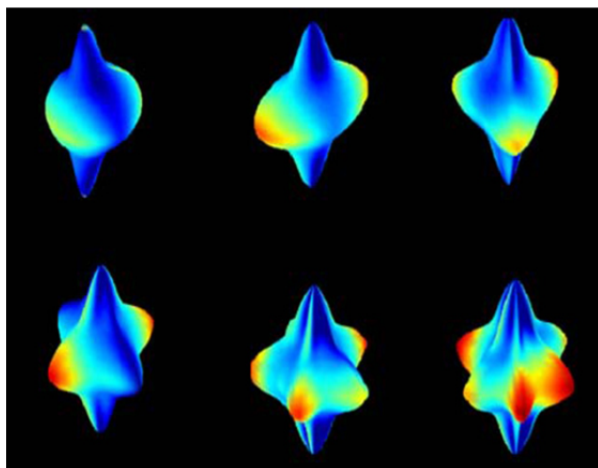
We have started to work on the design of a device for the SERS study of molecules in a micro-flow system. Firstly, a prototype has been designed in order to carry out SERS measurements within a millimetre-diameter capillary tube. In particular, intense SERS spectra of a probe molecule have been registered along the capillary diameter, in a static regimen. These measurements were carried out using an optical microscope equipped with a long distance objective and a depth spectral register system.

Research activities pertaining mainly to the theoretical Optical Spectroscopies on Metal Nanostructures have been accomplished, under the auspices of the projects NANOPLAS: OPTICAL PLASMONIC NANOANTENNAS (FIS2009-11264) and CONSOLIDER-INGENIO project EMET: Engineering METamaterials (CSD2008-00066):

•**Optical properties of metallic nanostars & nanorods:** We have investigated theoretically the optical properties associated to the excitation of Localized Surface Plasmons (LSP) on Ag & Au nanoparticles with various shapes. On the one hand, Au nanostars are studied as candidates for efficient thermal heaters at their intense LSP resonances. Numerical calculations were performed through the 3D Green's Theorem method to obtain the absorption and scattering cross sections for Au nanoparticles with star-like shape of varying symmetry and tip number (modelled by a supershape). Their unique thermoplasmonic properties make them especially suitable for **optical heating** and in turn for *photothermal cancer therapy* (see ScienceShot attached). In addition, we have shown, by exploiting genetic optimization algorithms that such shapes lead, among a variety of them, to maximized LSP cross sections. On the other hand, we have proposed two different configurations for which the **Fano-like interference** of longitudinal LSPs occurring at individual metallic nanorods can be employed in *refractive index sensing*: a colloidal suspension of nanospheroids (nanorice) and a single nanowire with rectangular cross section (nanobelt) on top of a dielectric substrate.

ScienceShot: Gold Nanostars for Attacking Cancer

by Kate McAlpine on 6 January 2012, 1:40 PM



Credit: R. Rodríguez-Oliveros and J. Sánchez-Gil/Spanish National Research Council

Gold stars, so tiny that it would take a thousand of them to span the diameter of a human hair, could be effective tumor-fighters. Previous studies have shown that minuscule particles of metal or other materials, directed to a tumor and then manipulated by lasers or magnetic fields, can kill off malignant cells by heating them up. Now, researchers suggest that golden particles could burn hotter if fashioned into stars. Gold is already an excellent radiator because electrons on its surface efficiently capture light, but when that surface is spiky, the energized electrons collect at the points, producing higher temperatures, as illustrated above. In a paper published this week in *Optics Express*, the team reported that an eight-pointed star could generate temperatures more than ten times higher than a spherical particle. Moreover, it absorbs lower-energy light, and this would make the treatment easier on healthy cells caught in the beam. A 20-pointed star might be even better, but the scientists haven't done those calculations yet.

•**Semiconductor Nanowire Photoluminescence:** We have experimentally demonstrated the directional emission of polarized light from single semiconductor nanowires. The directionality of this emission has been directly determined with Fourier microphotoluminescence measurements of vertically oriented InP nanowires (see figure attached, Chap 2A). Nanowires behave as efficient optical nanoantennas, with emission characteristics that are not only given by the material but also by their geometry and dimensions. By means of finite element simulations, we show that the radiated power can be enhanced for frequencies and diameters at which leaky modes in the structure are present. These leaky modes can be associated to Mie resonances in the cylindrical structure. The radiated power can be also inhibited at other frequencies or when the coupling of the emission to the resonances is not favored. We anticipate the relevance of these results for the development of nanowire photon sources with optimized efficiency and/or controlled emission by the geometry. This has been carried out in collaboration with the groups of Dr. Jaime Gómez Rivas (FOM-Institute AMOLF and Philips Research Labs, Eindhoven).

INFRARED AND RAMAN BIOSPECTROSCOPY

Two-dimensional infrared and Raman spectroscopy have been applied for searching new spectroscopic biomarkers that can be useful for diagnosis of Alzheimer's disease using plasma from peripheral blood. New biomarkers have been found in the 3100-800 cm^{-1} Raman region regarding lipid/protein ratio and protein structure. Protein β -sheet structure enrichment at the expense of α -helices is observed in the course of this disease, as well as increasing of lipid/protein ratio. Multivariate statistical analysis has been applied also by combining the Raman and infrared biomarkers that have been found so far, whereby correct classifications can be get with about 90% sensitivity and specificity.

STRUCTURE OF BIOLOGICAL SYSTEMS IN FOOD

In collaboration with the Institute of Science and Technology of Food and Nutrition (ICTAN, CSIC) we have applied Raman spectroscopy to elucidate lipid and polysaccharide structures in various olive oil-in-water emulsions having either inulin or dextrin. Although these emulsion systems exhibit similar micellar structure and lipid interactions, polysaccharide-water hydrogen bonding was found to be stronger when inulin is present. This can explain the fact that the technological properties of inulin emulsions are different from those of emulsions having dextrin.

In collaboration also with the Institute of Science and Technology of Food and Nutrition (ICTAN, CSIC) we have developed methods that can be used to set fish processing and storing conditions and to verify whether or not fish is fresh or has been frozen previously. The results obtained with certain physico-chemical markers, including the low field NMR relaxometry signal, have led to develop models that can monitor the frozen hake quality and predict the time and temperature of storage. These results show the great potential of low field NMR relaxometry and vibrational spectroscopy to identify fresh, frozen and thawed fish. Thus it has been provided a methodology to control the risk of unfrozen fish when consumed as raw or subjected to treatments that do not remove anisakis larvae (Rule of EU 104/2000 and 2065/2001). Therefore, these methods can cover some aspects of fish quality and commercial fraud as well as of health risk.

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.
- Rotational energy transfer coefficients by molecular collisions .
- Molecular solidification in cryogenic liquid micro-jets.
- Spectroscopic parameters of molecules of atmospheric relevance.
- Molecular Quantum Control.
- Molecular Alignment and Orientation.
- Ultracold Quantum gases.

EMPLOYED TECHNIQUES:

- IR spectroscopy and mass spectrometry applied to low temperature, low pressure systems.
- Computacional methods: Gaussian, SIESTA, CASTEP.
- Cold plasma generation in low pressure gas discharges.
- Mass spectrometry of ions and neutrals with energy resolution.
- Visible emission spectroscopy of plasmas.
- Langmuir probes for electron energy and charge density measurements.
- Linear Raman Spectroscopy.

- Supersonic gas jets.
- Undercooled liquid micro-jets.
- Cryogenics.
- Stimulated Raman Spectroscopy.
- Raman-Raman Double Resonance Spectroscopy.
- Frequency-Difference Infrared Spectroscopy.
- 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 a closed-cycle He cryostat we can extend our experimental range down to 6 K covering a temperature interval very interesting in astrophysics. In the following paragraphs we describe in more detail the main contributions achieved during the last year.

Following our line of research with astrobiological propensity, which we initiated with the study of glycine, described in last year's Memory, we have focused on another amino-acid, alanine, detected in asteroids with a dextro/levo ratio different to that in our planet. By means of the technique that we developed for these systems, we have carried out a spectroscopic study of alanine in its neutral and zwitterionic forms, both isolated and in different polar and non-polar environments. We could follow structural changes in a temperature span between 25 and 200 K. One of the main conclusions was that the neutral form can be expected to dominate over the zwitterionic in astronomical media, in low-temperature conditions where non-polar molecules, like CO_2 or CH_4 could be present.

Prompted by the observation of an absorption feature at a 4.62 μm in some astrophysical lines of sight, attributed in principle to the cyanate ion, OCN^- , we have undertaken a spectroscopic study of ices containing cyanate and water. The experimental conditions have covered a range of temperatures and concentrations, and have been supported by several theoretical calculations. Our results conclude that the above mentioned feature can undergo important variations in frequency and intensity depending on the sample environment. As a by-product, we detected the spontaneous decomposition of cyanate into bicarbonate, HCO_3^- , in water solutions. Bicarbonate has never been detected yet in astrophysical measurements. In our research we put forward a possible detection region for this species, in function of the accompanying species expected in its environment. Our results have been collected in two papers, one of them published in 2012, and the other one recently accepted for publication. Moreover we have conducted an investigation on the morphology and crystallization kinetics of water ices grown under different conditions. The ices generated were candidates to be present in different astrophysical environments and the magnitudes characterized in our work are crucial for the interpretation of the physical and chemical processes that take place on those ices. We have also carried out some new research on the $\text{CO}_2/\text{H}_2\text{O}$ system, in collaboration with Guillermo Muñoz Caro's group at CAB. A paper has been submitted, and the main results will be reported in due time.

Some results of our research have been included in a review paper about ices and their diverse characteristics, both in terrestrial geophysical conditions and in other bodies of our solar system.

Regarding atmospheric studies, we have carried out a thorough theoretical study on thermodynamical properties of iodine oxides. These compounds have received considerable attention in the atmospheric community mainly due to both their potential role in the catalytic destruction of ozone and their contribution to the formation of aerosol particles. This investigation has been done in collaboration with the University of Leeds, and the final results will be published soon.

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

We have studied the dynamics of H_2+N_2 plasmas in continuation of last year's work. In this period we have dealt with different N_2 ratios (1-10%) with a total mixing pressure of 8 Pa, large enough to favour gas phase collision protonation reactions, with preferential formation of NH_4^+ as predominant ion. This effect takes place even at

minimum NH_3 concentrations. The interest of this work lies in its astrophysical implications. NH_4^+ is a relevant species, predicted to be relatively abundant in some interstellar regions where ammonia could desorb from dust grains, but its identification in astrophysical media is still a matter of debate. We showed in previous investigations that the heterogeneous formation of NH_3 is dominant in chemical reactions with neutral molecules, whereas the distribution of ionic species depends on two competing factors, namely ion-molecule reactions, and direct ionization by electronic impact, which in turn depends on the electronic temperature.

We have also carried out time resolution kinetic studies on H_2+N_2 discharges. Comparisons of the experimental findings with predictions from our previously developed theoretical model have shown satisfactory agreement.

A new research line has been started on H_2+O_2 discharges to study H_2O formation at reactor surfaces, and the appearance of protonated ions (H_3^+ , H_3O^+ , HO_2^+). We are elaborating a kinetic model to interpret our results. Besides, we have studied $\text{H}_2+\text{N}_2+\text{O}_2$ mixtures, finding that the relative abundance of the protonated species can be explained in terms of the proton affinity of their precursor molecules.

In H_2 discharges, we have followed atomic and molecular plasma emissions by means of high resolution (<0.01 nm) spectroscopy in the visible region. This research has allowed us observing three kinds of broadenings on the Balmer lines of atomic H, which can be interpreted as due to the very different kinetic energies of the atoms. Moreover, we have measured the rotational and vibrational temperatures of H_2 . Different groups of particles present energies that vary in a wide range of values, up to five orders of magnitude, showing a behavior far from thermodynamic equilibrium. A simple model used to interpret the mass spectrometry ion energy measurements confirms that the most energetic H atoms are caused by charge transfer processes.

Dynamics and kinetics of chemical reactions

The study of the dynamics of $\text{D}^+ + \text{H}_2$ and $\text{H}^+ + \text{D}$ reactions has been finished and published. Special emphasis was laid in the simulation of the extensive set of cross sections and rate coefficients accumulated since the eighties for these systems. Three theoretical approaches have been applied: quantum mechanical (QM) calculations, Quasiclassical trajectory (QCT) calculations and a quasiclassic statistical (SQCT) model. For the two reactions studied, the best global accord with experiment is obtained with the QCT method. QM calculations perform also well though somewhat worse than their classical counterpart. The worse results correspond to the SQCT model, which is only adequate at low energies. The results of the comparison also show that the most reliable experimental measurements are those from the "merged beams" method. None of the theoretical approaches reproduces satisfactorily the experimental rate coefficients for the $\text{H}^+ + \text{D}$ reaction at collision energies below 0.2 eV, where the system is relevant for astronomical environments.

A QM and QCT study of the dynamics of the $\text{Mu} + \text{H}_2(v=0,1)$ y $\text{D} + \text{H}_2(v=0,1)$ has been also carried out. The comparison of QM, QCT and experimental data has confirmed the initial expectations of important tunneling in the slightly exoergic $\text{Mu} + \text{H}_2(v=1)$ reaction. It is probably the clearest manifestation of tunneling in any chemical reaction. In spite of the lightness of muonium (Mu), an atom formed by a positive muon and an electron, tunneling is not visible in the endoergic $\text{Mu} + \text{H}_2(v=0)$ reaction due to the large zero point energy associated with the production of MuH . A detailed analysis shows that tunneling in $\text{Mu} + \text{H}_2(v=1)$ is largely caused by a breakdown of the vibrational adiabaticity ($v=1 \rightarrow v=0$) along the reaction path.

MOLECULAR FLUID DYNAMICS

We have continued the study of fluid flow at the interface between the microscopic description, essentially molecular and quantum, and the macroscopic one, governed by the continuum fluid mechanics. Although both limits are well developed as independent fields, their link is a sort of no-man's land lacking experimental data, sufficiently rigorous theoretical models, and efficient calculation methods. From the experimental point of view, undercooled liquid jets are an ideal medium for studying the homogeneous solidification, free from container wall effects or impurities. On the other hand, supersonic gas jets are a very fruitful research media, where the study of inelastic collisions, the fundamental mechanism of energy transfer between gas molecules, can be afforded.

Along the last nineteen years we have built at the Laboratory of Molecular Fluid Dynamics two complete instruments for jet diagnostics by Raman spectroscopy, whose performance and flexibility are unique worldwide. One of them (A) is devoted to the study of liquid jets, and the other one (B) to inelastic collisions. Some improvements have been carried out along 2012 on these instruments, like the acquisition of a portable microscope to inspect the nozzles "in situ", and a micropositioning stage to replace the scanning system of the spectrograph at instrument (B).

Liquid microjets (filaments) of mixtures of *para*-H₂ with *ortho*-D₂ (1%, 5% and 10%) and Ne (0.3%, 1% and 2%), and of *o*D₂ with *p*H₂ (2% and 5%) and Ne (1%, 2% and 5%) were produced at instrument (A), in a joint project with the University of Frankfurt (Germany). These filaments, 5 microns in diameter, are cooled by surface evaporation in vacuum, yielding liquid samples highly undercooled below their melting point, until they solidify or break into droplets. Series of Raman spectra at different axial distances have been recorded on these filaments, monitored by laser shadowgraphy, allowing us to track the crystallization with a time resolution of ~10 ns. It was found that small amounts of impurities delay significantly the crystallization of *p*H₂ (and to a lesser extent that of *o*D₂), a quantum effect not previously observed. These experiments were completed with a hydrodynamic model of the filament temperature with distance to the nozzle, in collaboration with A. Gogolin of the Landau Institute and T. Elizarova of the Russian Academy of Science, both in Moscow.

In order to study the H₂O: He and H₂O:H₂O inelastic collisions, we have measured at instrument (B) many series of Raman spectra of supersonic jets of H₂O and He mixtures, at concentrations of 1.4%–34% and pressures $p_0 = 37$ –320 mbar, from a 350 micron nozzle at 398 K, using the new controlled evaporator-mixer that we installed on last year. It was checked that all those jets were free from H₂O condensation, a must for the quantitative analysis of the collisional kinetics. From the analysis of the time evolution of the rotational populations, obtained from the simulation of the Raman spectra, we have determined the average rate coefficients (both for H₂O:He and H₂O:H₂O collisions) for the 6 lowest levels of *ortho*-H₂O at 40 and 100 K. On the other hand, our measurements have been used to validate the state-to-state rate coefficients for H₂O: He inelastic collisions calculated by the group of Theoretical Molecular Interactions and Dynamics of the Instituto de Física Fundamental CSIC, which works in close collaboration with us. It must be stressed that our rates for H₂O:H₂O collisions are the first information available for that system, which cannot be calculated to date by theoretical methods.

We have completed a simulation of the vibrational spectra of CO₂ at high temperature (~ 2000 K), in collaboration with the University of Huelva. The simulation of this spectrum had not been achieved so far due to the strong Fermi resonance that severely breaks down the harmonic approximation of normal modes, and the large number of hot bands involved. The wavefunctions have been obtained from an algebraic treatment of the vibrational Hamiltonian, while the derivatives of the molecular polarizability have been refined from our own measurements. With this model we have successfully simulated spectrum of CO₂ in a flame, which can be used for the diagnostics of combustion media.

We have also finished an analysis, by Raman and Rayleigh scattering, of the condensation produced in planar supersonic jets of CO₂ from a 0.13×3.0 mm slit nozzle, and its comparison with circular nozzles. In the planar jet, the clustering starts later and progresses more slowly, allowing more clusters and of larger size to be formed, due to the smoother density and temperature drop than in the circular jet. An inverse correlation between vibrational temperature of the free monomers and the mean cluster size is also observed, suggesting some kind of cluster-mediated mechanism for the vibrational relaxation (almost non-existent otherwise) in CO₂.

Finally, in collaboration with P. Skovorodko of the Russian Academy of Science, temperature and density calculations of supersonic jets of H₂ and N₂ mixtures have been performed, including the shock wave structure, based on our previous experiments. The marked density and temperature gradients proper of the shock waves, and the large separation of H₂ rotational levels, impede these jets to be described with the conventional Navier-Stokes (NS) equations. Therefore, a model with parabolized NS equations, including viscous and diffusion effects, has been employed. In spite of an overestimation (by 10%) of the barrel shock radius, the numerical calculations very accurately reproduce all details of the density and temperature profiles, the position of the normal shock wave, and the species separation in the mixtures.

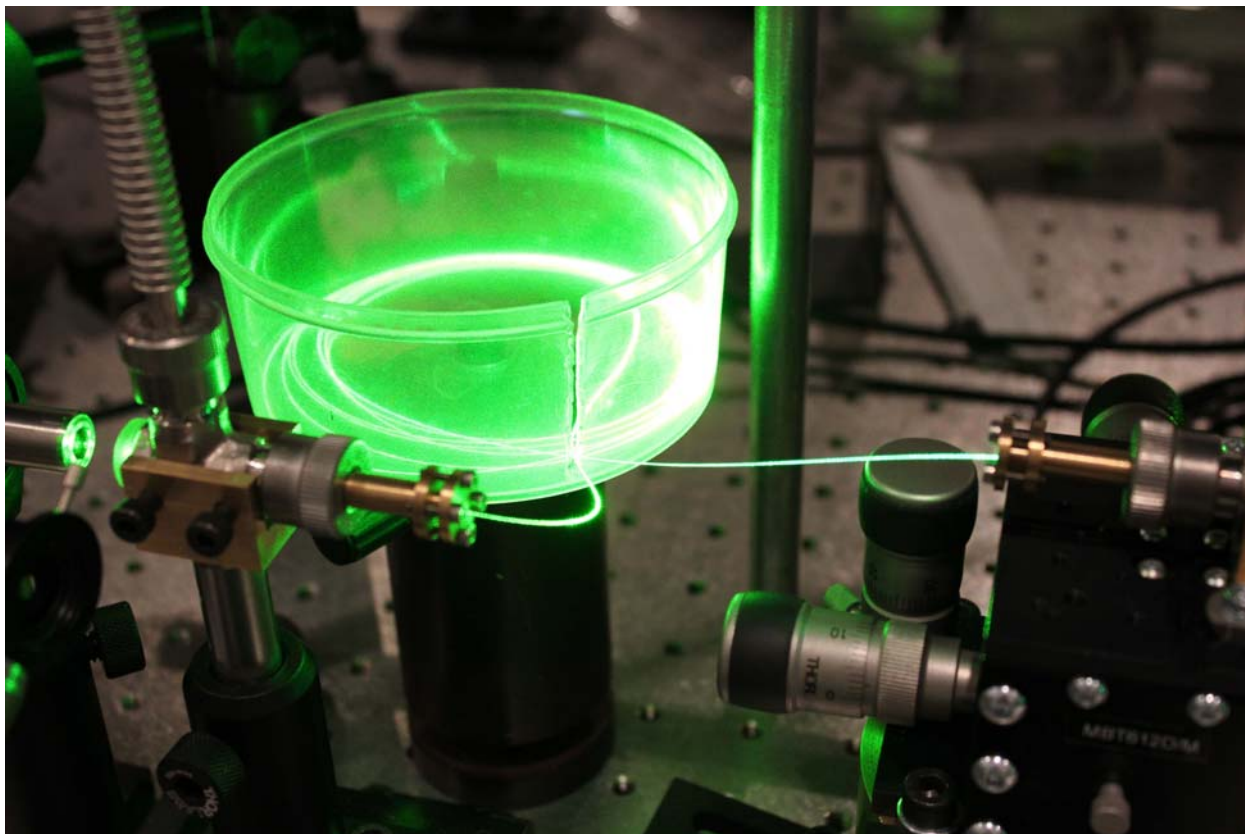
In the methodology section, we have developed, from the Navier-Stokes equations, a set of fluid dynamic equations free of approximations to relate density, rotational and translational temperatures, flow velocity, and entropy along the paraxial zone of silence of supersonic expansions. These equations include an explicit treatment of the dissipative effects due to the shear and volume viscosities and thermal conductivity. The aim of these equations is to supplement the information with magnitudes not directly measurable, such as translational temperature and entropy, and thus improve the precision of the experimental data. We have also refined the numerical procedures for the statistical treatment of experimental data of supersonic jets.

With regard to the methodology for studying the inelastic collisions from supersonic jets data, we have developed the novel concept of “average” rate coefficient for inelastic collisions associated to an energy level. This physical quantity is showing a great potential for the analysis of collisional phenomena within supersonic expansions.

Finally on the computational side, state-to-state rate coefficients for inelastic collision of *ortho*-D₂ molecule between 20 and 300 K have been obtained, allowing us to check the accuracy of the bulk viscosity and relaxation equations previously developed in our laboratory.

LASER SPECTROSCOPY

We have continued the development of the stimulated Raman spectroscopy technique using cw lasers inside hollow-core photonic crystal fibers. The goal of this work is to demonstrate that the sensitivity enhancement due to the confinement of light inside a hollow core with ~ 4 microns diameter, together with an interaction length of 1-2 meters, is enough to allow the recording of high resolution gas phase Raman spectra with low power cw lasers. We have recorded spectra from the Q-branches of the $2\nu_2/\nu_1$ Fermi doublet of CO₂, resolving the rotational structure in $2\nu_2$ at 15 mabr. We have also recorded the Q branch of O₂ at 1555 cm⁻¹. Comparing with previous results, using cw lasers and multipass cells, we have achieved a sensitivity enhancement factor of about 300, and >6000 in comparison with the single focus regime.



“Stimulated Raman spectroscopy inside a hollow core photonic crystal fiber”

The current results are already competitive with those of the quasi-cw technique, and there are several envisaged improvements that will allow for an even larger sensitivity enhancement.

In parallel with the activities above, high-resolution spectroscopic studies have been carried out using the technique of stimulated Raman spectroscopy on several molecular species:

- Mono-substituted ¹³C acetylene (¹³C¹²CH₂). The study of this species was undertaken within the framework of an already ongoing collaboration with the University of Bologna, whose main objective is the precise modelization of the rovibrational energy levels in all the family of isotopologues of acetylene (those which are mono- or bi-substituted with ¹³C and/or D atoms). We registered and analyzed the fundamental ν_2 band and the associated hot bands $\nu_2+\nu_4-\nu_4$, $\nu_2+\nu_5-\nu_5$, $\nu_2+2\nu_4-2\nu_4$ and $2\nu_2-\nu_2$ at temperatures between 298 and 355 K. The $2\nu_2-\nu_2$ band was registered at 170 K with the Raman-Raman double resonance technique. Analysis of the results rendered a new set of molecular parameters for this species, which satisfactorily accounts for the anharmonic resonances observed in the spectrum.
- Osmium Tetroxide (OsO₄). The Raman spectrum of the “breathing” vibration of this spherical top (ν_1) was recorded in a multi-isotopic sample, which allowed observation of the band, with good S/N conditions, for the four most naturally abundant isotopologues (¹⁹²OsO₄, ¹⁹⁰OsO₄, ¹⁸⁹OsO₄, ¹⁸⁸OsO₄). The data obtained from these spectra were analyzed jointly with those obtained in prior measurements at the University of Bourgogne (Dijon). This analysis has resulted in a precise determination of the equilibrium bond length of the most naturally abundant isotopologue (¹⁹²OsO₄).

- Carbon tetrafluoride (CF₄). This molecule has recently attracted some interest in atmospheric studies due to its large Global Warming Potential (GWP), ~6000 times larger than that of CO₂, and its very long lifetime, ~50000 years in atmospheric conditions. The study of this species started in our lab already in 2011, again in collaboration with the spherical top group of the University of Bourgogne (Dijon). Throughout 2012 we have carried out additional measurements in order to complement those of 2011, more specifically of the ν_1 and $3\nu_2-\nu_2$ bands. The analysis of all the collected data has allowed us to propose a very precise value for the equilibrium bond length of CF₄.
- Nitrogen (N₂). Using the Raman-Raman double resonance technique, which optically pumps population to an excited vibrational state, we have populated the $v=1$ state of this species in order to observe it, a few nanoseconds later, by high-resolution Raman spectroscopy. This has allowed the observation to take place at a temperature of 77 K and a pressure of 6 mbar, very favorable experimental conditions for high-resolution spectroscopy which are in stark contrast with prior observations carried out by other groups, at temperatures above 1200 K and much higher, almost atmospheric pressures. The analysis of the spectrum obtained has rendered new values for the line frequencies and molecular parameters, which are more precise than those available up to now.

THEORETICAL MOLECULAR PHYSICS

Molecular Quantum Control. Molecular alignment and orientation

We have continued the control of alignment and orientation of polar molecules in optical lattices, using a combination of static electric field and non-resonant intense laser fields. We have investigated combinations of frequency and wavelength that produce different geometric patterns in the dipole orientation in a tight binding optical lattice. Long range dipolar interaction strongly affects the macroscopic properties of a quantum gas. The control of the geometric distribution of dipole orientation enables a fine tuning of these properties.

A very important application of this system is quantum computing. We have continued the study of the control of the entanglement between two interacting dipolar molecules using external fields in an optical lattice and started the study of three molecules in different geometrical settings.

Significant molecular orientation can be achieved by time-symmetric single-cycle pulses of zero area, in the THz region. We show that in spite of the existence of a combined time-space symmetry operation, not only large peak instantaneous orientations, but also nonzero time-average orientations, over a rotational period, can be obtained. We show that this unexpected phenomenon is due to interferences among eigenstates of the time-evolution operator, as was described previously for transport phenomena in quantum ratchets. This mechanism also works for appropriate sequences of identical pulses, spanning a rotational period. This fact can be used to obtain a net average molecular orientation regardless of the magnitude of the rotational constant.

A consensus that questions the perfunctory use of the quantum adiabatic theorem has emerged since Marzlin and Sanders showed the existence of an inconsistency in the applicability of the theorem. Further analysis proved that the inconsistency may arise from the existence of resonant terms in the Hamiltonian, but recent work indicates that the debate about the full extent of the problem remains open. We have shown that key premises required in the standard demonstration of the theorem do not hold for a dual Hamiltonian involved in the Marzlin-Sanders inconsistency. Also, we showed that two simple conditions can identify systems for which the adiabatic approximation fails, in spite of satisfying traditional quantitative conditions that were believed to guarantee its validity. Finally, we have proven that the inconsistency only arises for Hamiltonians that contain resonant terms whose amplitudes go asymptotically to zero.

A detailed theoretical formalism for the calculation of energy levels and eigenfunctions of molecules with a large amplitude coordinate in the presence of a strong laser pulse is developed based on a discrete variable representation to setup the Hamiltonian matrix. This approach is applied to nonrigid biphenyl-like molecules displaying a large amplitude motion corresponding to respective rotations of their two groups. The eigenvalues and eigenvectors obtained in several limiting cases of the hindering potential can be symmetry labeled and provide us with useful insights into the feasibility of torsional alignment. The present results support the rotation-induced breakdown of torsional alignment, under adiabatic following, previously described [Phys. Rev. Lett. 107, 113004 (2011)].

Ultracold Quantum gases

We have developed the study of momentum generation in a system of atoms or molecules at rest by applying an unbiased time and spatially periodic laser field. Without interaction the generation of an asymptotic current is only possible when both time and spatial symmetry of the system are broken. Our previous 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 included the effect of interaction in the previous model and found that a finite asymptotic current can be generated by a single pulse modulation of the interaction parameter.

2B.4 MACROMOLECULAR PHYSICS DEPARTMENT

RESEARCH LINES:

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

RESEARCH SUBLINES:

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

EMPLOYED TECHNIQUES:

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

- X Photon Correlation Spectroscopy (XPCS).
- Simulations using high performance computing.

RESEARCH ACTIVITY:

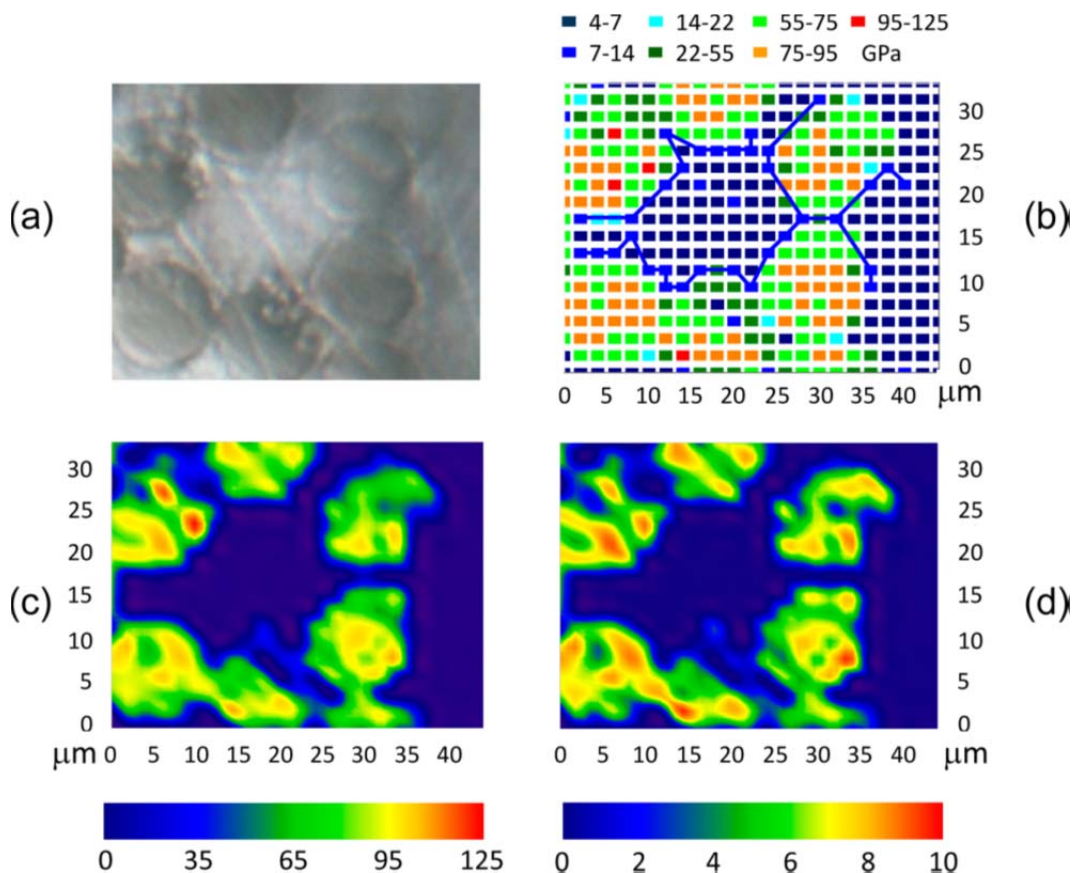
Group of NANOSTRUCTURE AND MECHANICAL PROPERTIES OF POLYMER SYSTEMS

MULTILAYERED THIN FILMS

Continuing the research on multilayered polymer systems, the development of crystalline lamellae in ultra-thin layers of a crystallizable polymer such as poly (ethylene terephthalate) PET confined between glassy polycarbonate (PC) layers in an alternating assembly has been investigated as a function of layer thickness by means of X-ray diffraction methods. Isothermal crystallization of PET from the glassy state has been in-situ followed by means of small-angle X-ray diffraction. It has been found that the reduced size of the PET layers influences the lamellar nanostructure and induces a preferential lamellar orientation. Two lamellar populations flat-on and edge-on have been found to coexist in a wide range of crystallization temperatures and within layer thicknesses down to 35 nm. Flat-on lamellae appear at a reduced crystallization rate with respect to bulk PET giving rise to crystals of similar dimensions separated by larger amorphous regions. In addition, a narrower distribution of lamellar orientations develops when the layer thickness is reduced or the crystallization temperature is raised. In case of edge-on lamellae, crystallization conditions also influence the development of lamellar orientation; however, the latter is little affected by the reduced size of the layers. Results suggest that flat-on lamellae arise as a consequence of spatial confinement and edge-on lamellae could be generated due to the interactions with the PC interface. On the other hand, the crystalline morphology and the nanostructure of a multilayered system of two semicrystalline polymers, isotactic polypropylene (iPP) and polyamide 6 (PA6), have also been studied. Contrary to the above experiments, performed on a semicrystalline/amorphous system, iPP/PA6 films do not exhibit a well defined maximum in the USAXS patterns. This result accounts for an irregular layered structure, as further confirmed by means of TEM images. Nevertheless, such a layered assembly still influences the crystallization behaviour of both constituent polymers. On the one hand, the crystallization of PA6 within the multilayered material is substantially hindered as evidenced by its weak scattering intensity. Real time studies as a function of temperature have undoubtedly detected the presence of a WAXS peak and a SAXS maximum associated to PA6 above the melting temperature of iPP. On the other hand, SAXS and WAXS measurements at room temperature have revealed the occurrence of an oriented lamellar morphology within the iPP layers bearing uniaxial symmetry around an axis perpendicular to the layers surface. Results have shown that the crystalline molecular chains are located mainly parallel to the layer surfaces forming edge-on lamellae. Moreover, X-ray scattering results are in agreement with the occurrence of two populations of lamellae, both edge-on and perpendicular to each other, in agreement with the crosshatched morphology observed by AFM.

LOCAL SURFACE MECHANICAL PROPERTIES OF HIERARCHICAL COMPOSITES

Nanoindentation testing, using the continuous stiffness measurement (CSM) option, is a powerful technique for characterizing the local surface mechanical properties of polymeric films and heterogeneous polymer-based composites. Optimizing the interphase properties in polymer–fiber laminates represents a major issue in the development of materials for high structural applications. Carbon nanotube-based hierarchical composites offer a challenging route to produce polymer–fiber laminates with enhanced interlaminar properties. The influence of nanotube reinforcement on the interphase properties between the polymer matrix and the microfiber is a factor of major concern. Nanoindentation has been used to explore the mechanical properties of single-walled carbon nanotube (SWCNT)-based multiscale (or hierarchical) composites comprising glass fiber mats alternated with SWCNT-reinforced poly(ether ether ketone) (PEEK). The CSM technique has been used to determine elastic modulus and hardness at the fiber, at the matrix, and across the interface, as a function of indentation depth from small penetrations of around 50 nm. It has been shown that the polymer–fiber interface can be readily detected using CSM. Most importantly, the interphase has been identified after consideration of fiber-bias effects. In addition, it has been found that the SWCNTs not only reinforce the polymer matrix at the nanoscale but also enhance the interphase properties with the microscale fibers. As shown in the figure below, a mapping of the mechanical properties has revealed that nanoindentation outstandingly reproduces the surface topography and precisely locates the interphase properties at the boundary between the fibers and the matrix. It has been concluded that multiscale reinforcement can be a convenient route to provide polymer–fiber laminates with improved interphases.



(a) Optical micrograph of the region selected for the nanoindentation test. The area was probed using an array of 23×18 indentations of 100 nm penetration depth. (b) Mesh of reduced indentation modulus values at specific X and Y positions. (c) Reduced modulus E_r and (d) hardness H contours, respectively, constructed by interpolating the mesh of indentation data. The color scale (in GPa) appears below.

NANOSTRUCTURE AND VISCOELASTICITY OF NOVEL POLYELECTROLYTES

Novel polyelectrolytes with enhanced thermal and mechanical properties have been investigated in collaboration with the group of Dr. Romo Uribe (UNAM, México). Nanoclay montmorillonite (MMT) reinforced polyelectrolytes based on polydimethylaminoethylmethacrylate (PDMAEM) were prepared. The protonated polymer (PDMAEMH) was solution mixed with functionalized MMT. Recognizing that the sort of surfactant may have a profound influence on the physical properties of the polymer matrix, neat MMT and MMT treated with different surfactants (sulfobetaine and ammonia) were utilized, and the concentration of the nanofiller was varied from 1% to 5%w/w. Strikingly, the protonated polymer exhibited a glass transition temperature of more than 100°C higher than the starting PDMAEM material. Moreover, viscoelastic measurements revealed that ionic interactions in PDMAEMH significantly hamper the molecular dynamics giving rise to much longer relaxation times. Furthermore, it was found that the type and amount of surfactant clearly influenced the dynamic storage shear modulus in nanoclay-polymer composites: those conditions favoring intercalated morphologies as revealed by X-ray scattering (ammonia surfactant and untreated MMT) gave rise to enhanced storage modulus with respect to that of the nanoclay exfoliated structures (using sulphobetaine or low concentrations of either surfactant). Results suggest that molecular dynamics is slowed down due to confinement of the macromolecules between the nanoplates.

ELECTROSPUN POLYMER MEMBRANES

Electrospinning offers a route to produce fibers with diameters in the micro- to the nano-scale, hence, expanding the range of applications of a polymer material. In collaboration again with the group of Dr. Romo Uribe (UNAM, México), we have investigated a number of electrospun polymer membranes, including different biodegradable and antibacterial polymers for medical applications and graphene-reinforced polyamides.

Poly (3-hydroxybutyrate) and its copolymers with poly-3-hydroxyvalerate (PHB/HV) represent biodegradable and biocompatible materials with great expectations in the biomedical field. However, their intrinsic hydrophobicity restricts applications as cell colonizing materials where cell growth is required. We have explored the possibility of tuning the hydrophobic behavior of PHB/HV copolymers by electro spinning. A number of polymer membranes

were produced using different electro spinning conditions (solution concentration and voltage). The most important finding was that the hydrophobicity of the electrospun fibers is mainly controlled by the filament diameter that, in turn, can be tuned by selecting adequate electrospinning conditions.

Poly(lactic acid) (PLA) is biodegradable aliphatic polyester that can be produced from renewable and sustainable sources. Regarding biomedical applications, there is great interest in the production of polymer membranes with antibacterial properties. Electrospinning has been used to produce membranes of PLA incorporating silver nanoparticles due to the well-documented antibacterial properties of silver. Scanning electron microscopy studies revealed that the morphology of PLA membranes was constituted by filaments and beads. These characteristics were also found in case of incorporation of silver nanoparticles, however, in this latter case, the filaments were thinner and the density of beads was reduced. Water contact angle measurements revealed that silver nanoparticles induced significant hydrophobicity in the membranes, hence, promoting bacteria growth inhibition.

In the last years, graphene has emerged as one of the most promising nanofillers for polymer composites. However, achievement of single-layered carbon sheets well dispersed in a polymer matrix is still a key step to obtain composites with superior properties. In this work, polyamide 6,6/graphene electrospun membranes were prepared through the following steps: i) direct oxidation of graphite powder to produce graphite oxide (GO); ii) reduction of GO dispersed in formic acid with hydrazine in the presence of nylon; iii) electrospinning of the nylon/graphene solutions. Electron microscopy and X-ray diffraction measurements revealed that the chemical reduction of GO was only partially successful. The nanocomposite membranes exhibited filament diameters in the nanometer scale. It was found that the electrospun process promoted the pseudo-hexagonal form of nylon6, 6 and that the nanofiller reversed this process enhancing the triclinic structure. In addition, graphene (or GO), was found to act as a nucleating agent enhancing the degree of crystallinity.

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

STRUCTURE AND DYNAMICS OF SOFT AND POLYMERIC MATTER NANOSTRUCTURED IN THREE DIMENSIONS

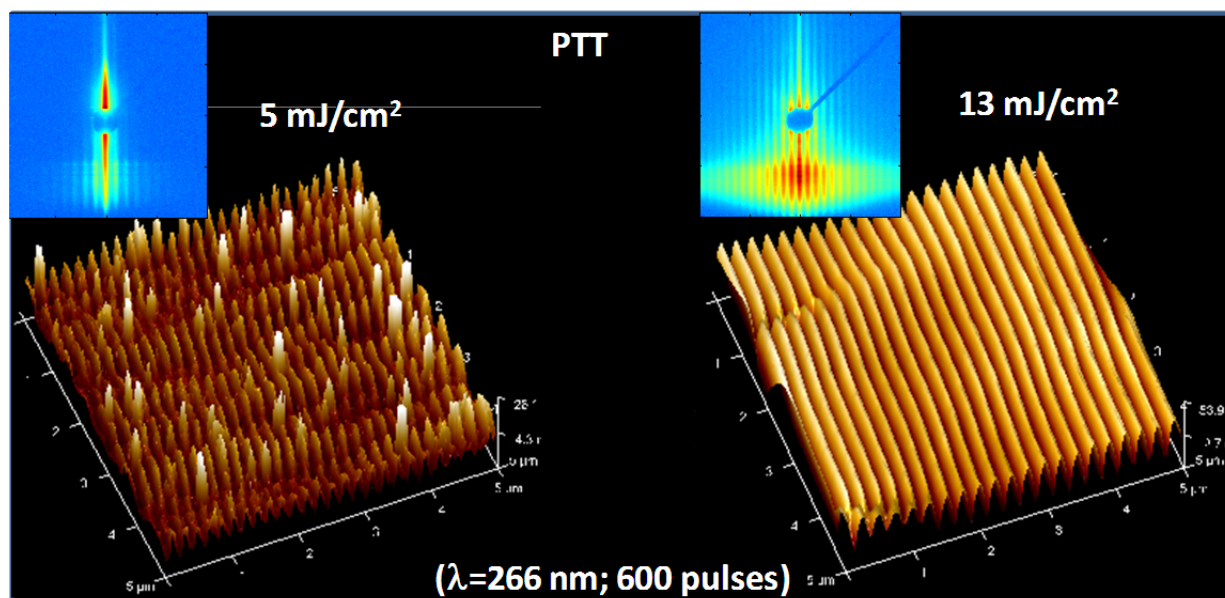
Semicrystalline Polymers

The structure-dynamics relationships in random copolymers of poly (trimethylene terephthalate) and poly (neopentyl terephthalate) (PTT-PNT) have been investigated by means of X-ray scattering and dielectric loss spectroscopy experiments. The results show that the incorporation of neopentyl terephthalate units into PTT chain decreases the ability to crystallize of the resulting copolymers as compared to that of PTT. The subglass dynamics of the copolymers is characterized by the existence of two processes, β_1 and β_2 . We propose that the high frequency secondary relaxation β_1 is associated with the most flexible part of the repeat unit, whereas the low frequency mode β_2 has been assigned to the carbon of the ester groups linked to the aromatic ring. On the contrary the poly (neopentyl terephthalate) (PNT), presents only one subglass process, that we hypothesize to have the same origin of the relaxation of β_2 relaxation in PTT. The segmental dynamics for the amorphous specimens, characterized by the α -process, follows an expected molar ratio behavior. A particular effect characterized by a reduction of the segmental mobility induced by the presence of the units is observed in the copolymers.

NANOFABRICATION OF POLYMER STRUCTURES

Polymer nanogratings

We have fully exploited the possibilities of using laser beams in order to nanostructure the surface of thin polymer films. In cooperation with the group of Dr. M. Castillejo (IQFR-CSIC) we have succeeded in nanofabricating laser induced periodic surface structures (LIPSS) in a series of strongly absorbing spin-coated polymer films such as poly(ethylene terephthalate), poly(trimethylene terephthalate), and poly(carbonate bisphenol A). We have established a methodology to use grazing incidence X-ray scattering techniques in the investigation of this type of systems. Irradiation of the polymer films by laser pulses of 6 ns at a wave length of 266 nm produces characteristics nanogrooves (polymer nanogratings) with period lengths similar to the laser wavelength. We have further extended this approach by demonstrating the formation of femtosecond polymer LIPSS by multipulse irradiation with the fundamental and 3rd harmonic of a linearly polarized Ti: sapphire laser (795 and 265 nm). Control and tunability of the size and morphology of the periodic structures become thus possible ensuring photochemical integrity of polymer films. We proposed that the nanostructures are formed by devitrification of the film surface at temperatures above the characteristic glass transition temperature of the polymers. The structural information obtained by both atomic force microscopy (AFM) and grazing incidence small-angle X-ray scattering (GISAXS) correlates satisfactorily. Comparison of experimental and simulated GISAXS patterns suggests that LIPSSs can be well described considering a quasi-one-dimensional paracrystalline lattice and that irradiation parameters have an influence on the order of such a lattice.



Atomic Force Microscope height images and Grazing Incidence Small Angle (GISAXS) patterns (upper left corners) of nanogratings of Poly (trimethylene terphthalate) (PTT) prepared by Laser irradiation at different fluencies (I. Martín-Fabiani et al. Langmuir 28, 7938, 2012).

Functional polymer surfaces for SERS applications

We have continued exploring the possibilities of creating functional surfaces by nanostructuring of polymers. In particular, in cooperation with Prof. Concepción Domingo of the Molecular Physics Dept. (IEM), we have prepared gold/polymer hybrid systems consisting on gold layers deposited by Pulsed Layer Deposition (PLD) over a nanostructured polymer thin films. We have explored the potential of these systems as substrates for surface enhanced Raman spectroscopy (SERS). Laser induced periodic surface structures (LIPSS) were obtained on thin polymer films of poly (trimethylene terephthalate) (PTT) upon laser irradiation with the fourth harmonic of an Nd: YAG laser (266 nm, pulse duration 6 ns) resulting in a period close to the incident wavelength. The nanostructured polymer substrates were coated with a nanoparticle assembled gold layer by pulsed laser deposition using the fifth harmonic of an Nd: YAG laser (213 nm, pulse duration 15 ns). Different deposition times resulted in thicknesses from a few nanometres up to several tens of nanometres. Analysis by atomic force microscopy and grazing incident small angle X-ray scattering showed that gold coating preserved the LIPSS relief. The capabilities of the produced nanostructures as substrates for SERS have been investigated using benzenethiol as a test molecule. The SERS signal of the hybrid nanostructure is substantially larger than that observed for a gold-coated flat substrate.

Advantages of this new type of SERS substrates are to be further explored.

Nanoimprint Lithography

We have continued using nanoimprint lithography (NIL) in polymers in the clean room of the Centro Nacional de Microelectrónica (CNM-CSIC, Barcelona). Grazing-incidence small-angle X-ray scattering (GISAXS) has been used to structurally characterize model hard and soft gratings of nanotechnological interest. The different gratings exhibit GISAXS patterns with characteristic features that can be associated with their level of order along the direction of periodicity and the length of the lines. Highly ordered gratings, made out of silicon by electron beam lithography, and those nanofabricated on spin-coated polymer films by nanoimprint lithography, exhibit characteristic semicircle-like GISAXS patterns with intensity spots periodically distributed on a semicircle whose radius is related to the incidence angle used. These gratings can be considered as one-dimensional crystalline lattices as provided by computer simulations. Less ordered polymer gratings prepared by the laser-induced periodic surface structuring method exhibit a GISAXS pattern characterized by periodic rod-like scattering maxima whose intensity decreases with increasing horizontal scattering angle. In this case the gratings can be considered as one-dimensional paracrystals. The transition from a rod-like to a semicircle-like GISAXS pattern has been simulated and attributed to the contribution of the form factor by changing the length of the line (ripple). A critical length value for the transition is located at around a few micrometres.

Polymer nanotubes and nanorods using alumina templates

In collaboration with the Instituto de Microelectrónica de Madrid, we are working on simple and controllable methods for fabrication of ordered arrays of polymers with interest in the field of energy and in the field of information technology. Precisely during this year we have prepared ordered arrays of poly (3-hexylthiophene) (P3HT) solid nanowires and hollow nanotubes by infiltrating the molten polymer into AAO nanopores at temperatures. Depending on the infiltration temperature partial or complete wetting regime occurs.

We have shown by small angle X ray scattering that such wetting regimes (and thus the formation of nanowires or nanotubes) are associated with a different internal structure in the P3HT melt. The physical behavior observed for P3HT might be extrapolated to other semiconducting polymers with similar comblike molecular architectures with applications in optoelectronics, thermoelectrics, and photovoltaics (like other poly (alkylthiophenes), polycarbazoles, polyfluorenes, polyphenylenes, etc.).

FUNCTIONAL POLYMER MATERIALS THROUGH ADDITION OF NANOPARTICLES.

Preparation of Composite Materials based on Carbon nanotubes or Graphene

Homogeneous and stable thin films of poly (butylene terephthalate) PBT and its nanocomposites based on single wall carbon nanotubes (SWCNTs) were prepared by spin coating. PBT thin films show crystalline structures for thicknesses above 40 nm, consisting of submicrometer size 2D-spherulites. In the case of nanocomposites, carbon nanotubes act as nucleating agents and provide a template for the crystallization of PBT. This gives rise to hybrid shish-kebab structures, even in the thinnest films (≈ 10 nm thick). For PBT thin films, the orientation of crystalline lamellae undergoes a transformation, changing from a disposition perpendicular to the substrate (“edge-on”) to a parallel arrangement (“flat-on”) after recrystallization. Using Raman microscopy it is possible to directly observe both, the degree of dispersion and the location of carbon nanotubes in the films. The results reveal that bigger agglomerates act as more effective nucleating points than isolated bundles of SWCNTs during crystallization of the polymer matrix.

In collaboration with the groups of Prof. Z. Roslaniec of the West Pomeranian University of Technology (Szczecin, Poland) we have investigated Polymer/expanded graphene (EG) nanocomposites based on Poly(ethylene terephthalate) (PET). Nanocomposites have been prepared by in situ polymerization. Morphology of the nanocomposites has been examined by transmission electron microscopy (TEM). The relationship between the preparation method, morphology, and electrical conductivity was studied. TEM images reveal that the nanocomposites exhibit well dispersed graphene platelets. The incorporation of EG to the PET matrix results in a sharp insulator-to-conductor transition. A low percolation threshold is observed attributed to the high aspect ratio, large surface area, and uniform dispersion of the EG sheets in PET matrix.

In cooperation with the group of Dr. M.A. López-Manchado (ICTP-CSIC, Madrid), we have investigated Natural rubber (NR) and functionalized graphene sheets (FGSs) nanocomposites prepared by conventional two-roll mill mixing. The morphology and structure of the FGS was characterized confirming the successful exfoliation of the FGS. The strong rubber-to-filler interactions accelerate the cross-linking reaction, increase the electrical conductivity and cause an important enhancement on the mechanical behavior of the NR nanocomposites. The nanofiller does not affect the molecular dynamics of NR, while the presence of vulcanizing additives slows down the

segmental motions and decreases slightly the time scale of the global chain dynamics in NR/FGS nanocomposites. These functional properties make NR/FGS nanocomposites a promising new class of advanced materials.

COLUMNAR TiO₂ THIN FILMS

In collaboration with the group of Prof. A.R. González Elipe (Instituto de Ciencia de Materiales de Sevilla), we have investigated correlation lengths, porosity and water adsorption in columnar TiO₂ thin films prepared by glancing angle deposition. Porosity and some critical dimensions encountered in the investigated thin films impact on their optical properties when utilized as hosts or templates for the manufacture of other composite materials and for their potential use as antireflective coatings for solar cells and related applications.

DIELECTRIC PROPERTIES OF NANOCOMPOSITES BASED ON THERMOPLASTIC POLYMERS REVERSIBLY CROSSLINKED

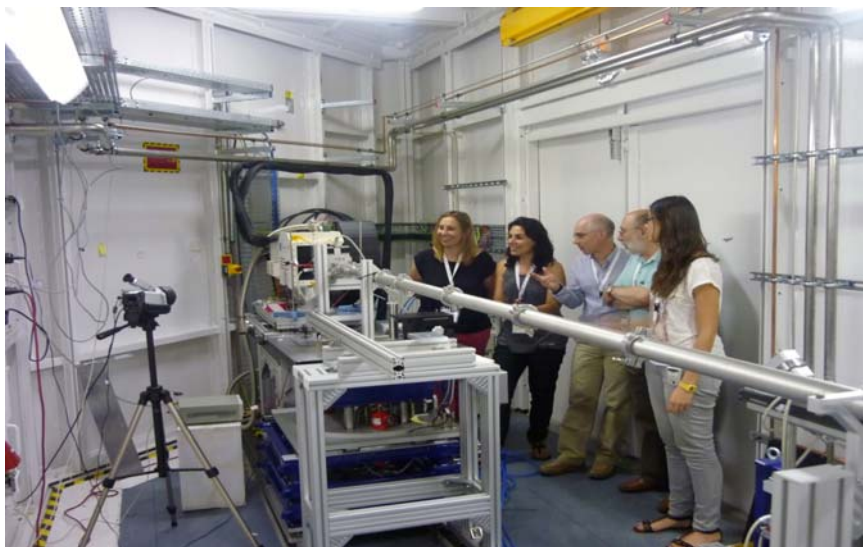
Continuing our cooperation with the University Ferhat Abbas of Algeria Wishing to take advantage of our previous experience in this field, we have extended our investigation to some other polymers of increasing interest and wide use, as, for instance, poly(ethylene terephthalate) PET, poly(ethylene naphthalene dicarboxylate) PEN, poly(methyl methacrylate) PMMA, and poly(vinylidene fluoride) PVDF. Moreover, we are especially interested in applying the procedure to obtain nanocomposites in one step to the preparation of nanocomposites of the preceding polymers with clay, graphite, and some other additives. We are making an especial emphasis in the study of the dielectrical properties of the resulting materials.

ATOMIC FORCE MICROSCOPY (AFM)

During the last year 2012 the AFM facility has been implemented with a system allowing in addition to the visualization of nanostructures and to the assessment of mechanical properties (elastic modulus, adhesion and deformation forces and nanoindentation) the evaluation of the piezoelectric effect (PFM). The new capabilities will enable to investigate the remnant polarization in ferroelectric samples with nanometer resolution. The technique has been tested successfully in nanogratings made of ferroelectric polymers.

First users of the Non Crystalline Diffraction beamline at the Spanish synchrotron ALBA

On July 2012, a team of the SOFTMAPOL was the first in using the new Non Crystalline Diffraction (NCD) beamline at ALBA. In a proposal approved by the scientific committee, and in collaboration with the company FAE S.A., we investigated the positive temperature coefficient effect of a series of composite materials based on carbon nanofibers using a combination of wide angle X-ray scattering, thermal imaging and electrical measurements simultaneously. Upon request, a report on the performance of the beamline was submitted to the scientific board. The performance of the beamline will be soon competitive at international level and new projects are currently being prepared.



Members of SOFTMAPOL by first measurements at Non Crystalline Diffraction (NCD) beam line at spanish synchrotron ALBA (<http://www.cells.es/>)

Group of BIOPHYSICS OF MACROMOLECULAR SYSTEMS

MULTISCALE SIMULATION OF PHYSICAL PHENOMENA IN MACROMOLECULAR SYSTEMS

Molecular dynamics of polymeric liquids

We have performed full atomistic computer simulations of the molecular dimensions and dynamics of molten entangled linear and short chain branched polyethylene chains of the same length with butyl branches content up to 55 per 1000 carbon atoms. This has been achieved by using a number of molecules equilibrated in all length scales by advanced Monte Carlo moves and Molecular Dynamics simulations. The simulations have been successfully compared with published experimental results and with recent theoretical approaches.

The effect of higher α -olefin comonomer on physical properties of short chain branched (SCB) polyethylene (PE) melts at 450 K has been studied using connectivity altering Monte Carlo simulations. The calculated chain dimensions, the entanglement tube and the solubility parameters are in very good agreement with the experimental data. The computed scaling relationships for both SCB melts and model PE solutions are close to the binary contact model and disagree with the packing model. This work is collaboration with NTUA and Mitsui Chemicals.

Coarse-grained models for the simulation of the crystallization process in polymers

We have developed a coarse-grained model (PE-CG) for the study of the crystallization process of linear and short chain branched polyethylenes. The evaluation of the PE-CG model shows that it correctly describes the macromolecular ordering during the cooling and heating cycles. In addition, the model is capable of predict, at least qualitatively, the melting and crystallization temperatures, the size of the nuclei and the crystal spacing at the early times of the processes as a function of the molecular architecture of the samples.

Theoretical studies of polymerization catalyst systems

The copolymerization of ethylene and methyl acrylate (MA) as catalyzed by a new Ni-based PymNox organometallic compound was studied computationally. Experimental results show that the unsubstituted catalyst is unable to incorporate the MA monomer, whereas methyl-substituted is able to achieve copolymerization. Based on energy profiles calculated at the BP86 level, a Curtin–Hammett mechanism was proposed to explain the different reactivities of the catalysts in ethylene/MA copolymerization. This model provides insights into the design of new catalysts to produce polar functionalized copolymers based on ethylene.

3D-QSAR chemometric tools to analyze the polymerization activity of a series of analogous zirconocene catalysts with different substitution patterns in the cyclopentadienyl rings have been applied. The selection of the most stable conformers was performed by means of a conformational analysis of the different catalysts in a step previous to the QSAR study. The calculated QSAR model has been assessed in robustness following a progressive scrambling protocol that helps to check redundancy in the descriptor space. This model presents a good predictive ability as tested with a set of four catalysts which are not included in the training set.

Development of force fields for the simulation of ionic liquids

Molecular dynamics simulations have been performed in order to investigate the properties of $[C_n\text{MIM}^+][\text{Tf}_2\text{N}^-]$ ($n = 4, 8, 12$) ionic liquids in a wide temperature range and at atmospheric pressure. The wide range of time scales that characterize the segmental dynamics of these systems, especially at low temperatures, required very long simulations to calculate the thermodynamic, structural and dynamic properties. The influence of the temperature and the cation's alkyl chain length on the above-mentioned properties was thoroughly investigated. The calculated thermodynamic and structural properties are in good agreement with the experiments, while the extremely sluggish dynamics of the ionic liquids under study renders the calculation of their transport properties a very complicated and challenging task, especially at low temperatures. This work has been done in collaboration with Prof. Ioannis Economou (Chemical Engineering Department of Texas A&M University at Qatar), Dr. Nuno Garrido (Universidade do Porto), Dr. Andreas Fröba and Mr. Thomas Köller (University of Erlangen-Nuremberg).

MOBILITY, ORDER AND NANOSTRUCTURE IN MACROMOLECULAR SYSTEMS

We have performed experimental studied focused on the physical properties of molecular models of polyolefins, blends and nanocomposites, both in the melt and solid states. In the study of homogenous molecular models we successfully detected the effect of short chain branches in the macromolecular mobility. This effect has been widely discussed in the literature, and there is no agreement among the very few experimental data obtained until now. However, our experimental evidences are in clear agreement with the atomistic simulations performed in these

systems by ours and other researchers. More interestingly, the matching of the atomistic results to reptation framework nicely explains the experimental evidences.

We have reported a strong effect of the third moment of the molecular weight distribution on the melt linear viscoelastic response of polydisperse linear polyethylene samples. The Newtonian viscosity and the steady-state compliance of experimental samples with broad molecular weight distributions shows a noticeable increase with respect to model linear samples with the same weight-average molecular weight but symmetric and narrower molecular weight distributions. These experimental results are in agreement with previous empirical and theoretical studies based on reptation concepts that predict a dependence of the basic properties in terms of the M_z/M_w ratio. The results shown here are of great importance, as these relationships have become a widely used tool, not only to test the molecular weight dependence, but also to assess the possible presence of long-chain branching in polyolefins.

We are also exploring the effect of the molecular architecture in different polymer/carbon nanotube composites. We successfully prepared nanocomposites with an excellent dispersion of the nanotubes in the polymeric matrices, by the aid of a specific treatment of the nanotubes. We have detected an interesting and unexpected effect of the molecular weight of the matrix in the linear viscoelastic response of the nanocomposites, with interesting basic implications concerning the nature of the polymer chain/nanotube interaction.

Concerning the solid state physical properties, a combined study of microstructure and mechanical properties for a series of model polyolefins has been performed. The analysis of the results focuses on the effect of branching, which modulates crystallinity, on the values of the elastic modulus. The typical variation found in the elastic modulus is discussed in terms of the existence of a rigid amorphous phase. This phase controls the macroscopic behavior of the materials, giving rise to an increase of the elastic modulus as the crystallinity does. Mechanical coupling models for heterogeneous systems are applied in order to describe the experimental results as a function of the variation of three different phase fractions, i.e., crystalline, rigid amorphous (or interfacial), and mobile amorphous. The phase fraction values obtained from the analysis of the mechanical properties are in qualitative agreement to those found experimentally by Raman spectroscopy.

SIMULATION OF BIOMACROMOLECULAR SYSTEMS

Molecular Dynamics of Epidermal Growth Factor Receptors (EGFR)

Epidermal growth factor receptors (EGFR) are associated with a number of biological processes of cellular growth and proliferation and are becoming increasingly recognized as important therapeutic targets against cancer. We have built models based on homology for the extracellular domains (ECD) of ErbB2-ErbB3, ErbB3 and ErbB4 in their active conformations, including a Heregulin ligand, followed by further refinement of the models by molecular dynamics simulations at atomistic scale.

A successful therapeutic treatment is a monoclonal antibody called trastuzumab which interacts with the ErbB2 extracellular domain (ErbB2-ECD). A better understanding of the detailed structure of the receptor-antibody interaction is indeed of prime interest for the design of more effective anticancer therapies. In order to discuss the flexibility of the complex ErbB2-ECD/trastuzumab, we present, in this study, a multi-nanosecond molecular dynamics simulation together with an analysis of fluctuations, through a principal component analysis (PCA) of this system. The simulation results are in excellent agreement with the available experimental information during the full trajectory. A movement of the antibody toward the dimerization domain of the ErbB2 receptor is reported for the first time.

BIOPHYSICS: THREE-DIMENSIONAL 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. To this end we have focused our interest in different biological systems:

- 1 Membrane anti-porter Na^+/H^+ SOS1 of *Arabidopsis thaliana*.
- 2 Epithelial Growth Factor Receptors (EGFR or ErBb).
- 3 HIV capsid protein complexes (gp proteins).
- 4 Virus like Particles (VLPs).
- 5 Reflectin.

These studies are being performed in collaboration with other groups at the Department of Crystallography and Structural Biology and the Department of Physical Chemical Biology (IQFR/CSIC) and also international laboratories as Sino Biological Ltd., (Beijing). Our last collaboration focused on the membrane proteins involved in the Na⁺/H⁺ channel of *Arabidopsis Thaliana* has been selected as Cover Picture the number of December of Journal of Molecular Biology. With these studies we are giving information about the dimensions, shape and solution dynamics of macromolecular complexes, which can be very useful to identify and describe their special arrangement and also the possible interaction with other biological agents. The systems under study are involved in interesting cell processes as external signal detection, environment adaptation and cellular transformation.

TRANSMISION ELECTRON MICROSCOPY at BIOPHYM

The TEM-BIOPHYM facility has been used to analyze several systems from scientific laboratories belonging to IQFR, ICTP and IEM (CSIC). The observations were oriented to shed light on the structural details of nanoparticles (metals, oxides, and graphene), nanotubes, nanoclays, polymeric materials and/or nanocomposites of them. The samples were analyzed as single particles dispersed on the grid surface or as ultrathin sections of polymers and nanocomposites. Following are listed some of the systems studied:

- Platinum, silver, gold and metal oxide nanoparticles.
- Gold nanoparticles coated with silica and magnetite nanoparticles coated with gold, silver and silica.
- Quantum dots.
- Ultrathin sections of polymeric matrixes with different nanoparticles (i.e. titanium, carbon nanotubes, graphene and nanoclays).
- Micelles and polymeric vesicles.

The main purpose of these measurements was to know the nanostructure of the nanoparticles particles or their dispersion and organization into the polymeric matrixes.

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 2009-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.

Descripción teórica de estructuras nucleares exóticas y reacciones.

Code or Reference: FIS2011-23565.

Funding Institution: MINECO.

Main Researcher: Pedro Sarriguren Suquilbide.

Duration: January 2012- December 2014.

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

Temas de gravedad cuántica: gravedad cuántica de lazos, teorías altoderivativas 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.

Cosmología Cuántica de Lazos y Agujeros Negros.

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

Funding Institution: MINECO.

Main Researcher: Guillermo A. Mena Marugán.

Duration: January 2012-December 2014.

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

Cosmology and Quantum Phenomena in the Universe.

Code or Reference: F2011TW01 Programa FORMOSA.

Funding Institution: CSIC and LECOSPA (National Taiwan University).

Main Researcher: Guillermo A. Mena Marugán.

Duration: January 2012-December 2013.

Objectives: Research in Quantum Cosmology, including mechanisms for late time acceleration, and resolution of singularities by effects of quantum geometry.

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

Code or Reference: COST Action CM0805.

Main Researcher: Nigel Mason (Open University UK) / IP IEM: M.L. Senent.

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.

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

Code or Reference: Marie Curie Action FP7-PEOPLE-2012-IRSES.

Funding Institution: European Community (Seventh Framework Programme).

Main Researcher: M. Hochlaf / IP IEM: M.L. Senent.

Duration: 2012-2016.

Objectives: Theoretical study of CO₂ scattering on a liquid-gas interface at the microscopic level.

Análisis espectral de moléculas prebióticas de relevancia astrofísica para los nuevos observatorios ALMA SOFIA and Herschel.

Code or Reference: 2011FR0018, CSIC-CNRS.

Funding Institution: CSIC-CNRS.

Main Researcher: M.L. Senent.

Duration: 2012.

Objectives: Determination of vibrational parameters of astrophysical relevant non-rigid molecules.

8º Taller Internacional en Sistemas Desordenados.

Code or Reference: MAT2011-14767-E.

Funding Institution: MICINN.

Main Researcher: Victor Gopar / IP IEM: Rafael Alejandro Molina Fernández.

Duration: January 2012-December 2012.

Objectives: Organization of the conference “8th Workshop on Disordered Systems”.

Fundaciones, cosmología y evidencias experimentales de modelos de gravedad cuántica / Foundations, cosmology and experimental signatures of quantum gravity models.

Code or Reference: E-28-2012-1009715.

Funding Institution: MINECO.

Main Researcher: Gianluca Calcagni.

Duration: September 2012-August 2017.

Objectives: The proposed research aims to extract observational signatures of theories of quantum gravity (especially fractal field theories) via phenomenological models. Effective descriptions of quantum gravity dynamics are used to predict new phenomena and quantum gravity corrections to known particle, astroparticle or cosmological physics.

Ion Traps for Tomorrow's Applications (IOTA).

Code or Reference: COST Action MP1001.

Funding Institution: MICINN.

Main Researcher: Martina Knoop /IP IEM: Jordi Mur Petit.

Duration: January 2011-December 2013.

Objectives: Development of scientific and technological applications of ion traps.

3.2 DPTO. DE ESPECTROSCOPIA NUCLEAR, VIBRACIONAL Y MATERIA DESORDENADA / NUCLEAR, VIBRATIONAL AND DESORDERED MEDIA SPECTROSCOPY

Plasmónica: detección molecular intensificada sobre nanoestructuras metálicas.

Code or Reference: FIS2010-15405.

Funding Institution: Ministerio de Ciencia e Innovación.

Main Researcher: Santiago Sánchez Cortés.

Duration: January 2010- December 2013.

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

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.

Estudio de la emisión de partículas tras la desintegración beta.

Code or Reference: ACI10-D-000584/IN2P3.

Funding Institution: MICINN-IN2P3.

Main Researcher: IEM, CSIC: M^a José García Borge / CENB, CNRS: Bertram Blank.

Duration: January 2011-December 2012.

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”.

Participación en el Comité ISOLDE del CERN.

Code or Reference: FPA2011-13736-E.

Funding Institution: Ministerio de Ciencia e Innovación.

Main Researcher: M^a José García Borge.

Duration: November 2011-October 2012.

Objectives: Participate in committees of the ISOLDE collaboration and in the technical and scientific committee of the HIE-ISOLDE project.

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: Ministerio de Ciencia e Innovación.

Main Researcher: Olof Tengblad.

Duration: January 2010- July 2013.

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.

Detección de radiación Gamma utilizando Material Centelleo Avanzado y Novedoso.

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

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

Funding Institution: Ministerio de Economía y Competitividad.

Main Researcher: Olof Tengblad.

Duration: November 2011-October 2014.

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

Física de Objetos compactos IV: Medidas de reacciones de interés en Novae y Nucleosíntesis explosiva.

Code or Reference: EUI2009-04162.

Funding Institution: Ministerio de Economía y Competitividad.

Main Researcher: Olof Tengblad.

Duration: May 2010- April 2014.

Objectives: Studies of reactions of astrophysical interest.

Óptica de Transporte de haz y diseño de un iman.

Code or Reference: EIC-CERN-2011-0022.

Funding Institution: Ministerio de Economía y Competitividad.

Main Researcher: Olof Tengblad.

Duration: May 2012-May 2015.

Objectives: Training of a technician in the international field.

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.

Espectroscopía gamma de alta resolución: En el camino hacia AGATA.

Code or Reference: FPA2011-29854-C04-01.

Funding Institution: DGI-MICINN.

Main Researcher: Andrea Jungclaus.

Duration: January 2012-December 2014.

Objectives: Development and construction of the AGATA spectrometer and nuclear structure studies.

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.

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

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.

Caracterización y Control de Nanoestructuras generadas por irradiación láser.

Code or Reference: CTQ2010-15680.

Funding Institution: Ministerio de Ciencia e Innovación.

Main Researcher: Marta Castillejo Striano.

Duration: January 2011-December 2013.

Objectives: This project aims at obtaining new knowledge on the physicochemical control mechanisms of micro- and nanofabrication of different types of materials using processing techniques based on irradiation and ablation with pulsed lasers in the nanosecond and femtosecond domains.

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.

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: Angel Cuesta.

Duration: 2009-2012.

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

Microdispositivos ópticos sensores (MICROSERES II).

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

Funding Institution: Comunidad de Madrid.

Main Researcher: Concepción Domingo Maroto (subproyecto IEM)

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.

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

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.

Hielos y plasmas de interés atmosférico y astrofísico: Simulaciones experimentales y teóricas.

Code or Reference: FIS2010-16455.

Funding Institution: Ministerio de Ciencia e Innovación.

Main Researcher: V.J. Herrero.

Duration: January 2011- December 2013.

Objectives: Laboratory and theoretical investigation of ices of astrophysical and atmospheric interest, in particular “dirty ices”, ionic species, and atmospheric ice nucleation and halogen surface reactions; plasmas.

Espectroscopía Láser de Gases de Interés en la Atmósfera o en Procesos de Combustión.

Code or Reference: FIS2009-08069.

Funding Institution: DGI (MICINN).

Main Researcher: José Luis Doménech Martínez.

Duration: January 2009-April 2013.

Objectives: To apply the laser spectroscopy techniques implemented in our Laboratory to the study of gas-phase molecular systems of relevance in atmospheric or in combustion processes. The goal of the studies is to obtain spectroscopic parameters of use in the interpretation of field measurements, and to verify formalisms and potential energy surfaces to advance in the knowledge of the physics of molecular collisions.

Estudio teórico-experimental de colisiones moleculares y condensación: de la fase gas a microchorros de hidrógeno líquido.

Code or Reference: FIS2010-22064-C02.

Funding Institution: MICINN.

Main Researcher: José M^a Fernández Sánchez.

Duration: January 2011-December 2013.

Objectives: State-to-state rate coefficients for inelastic collisions of CO and O₂ at low temperature, homogeneous clustering of O₂, and search for superfluidity in highly undercooled liquid microjets of para-H₂.

Thunderstorm effects on the atmosphere-ionosphere system.

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

Funding Institution: ESF Research Networking Programme.

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

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

Duration: 9 May 2011-9 May 2016.

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

Fenómenos Coherentes En Gases De Moléculas Dipolares Ultrafrías.

Code or Reference: FIS2010-18799

Funding Institution: MICINN.

Main Researcher: Julio Santos Gómez.

Duration: January 2011-December 2013.

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

3.4 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

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

Code or Reference: MAT2008-03232.

Funding Institution: Ministerio de Ciencia e Innovación.

Main Researcher: Aurora Nogales Ruiz.

Duration: January 2009-December 2012.

Objectives: This project aimed to develop the tools that allow controlling the diblock copolymer structure when these systems are confined in order to be able to tailor their properties for possible applications

Red de usuarios del laboratorio de dispersión de rayos X a ángulos altos y medios para materia condensada blanda.

Code or Reference: MAT2011-12921-E.

Funding Institution: Ministerio de Ciencia e Innovación.

Main Researcher: Aurora Nogales Ruiz.

Duration: January 2012-December 2013.

Objectives: To develop a prototype of bench top based wide angl

Study of novel multilayered two-dimensional polymer nanostructures using WAXS, SAXS and USAXS.

Code or Reference: Deutsches Elektronen Synchrotron (DESY) I-20110436 EC.

Funding Institution: EC.

Main Researcher: Francisco J. Baltá Calleja.

Duration: 2011-December 2012.

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

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.

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: January 2010-June 2013.

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.

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.

Duration: 1st January 2011- 31st December 2013.

Objectives: The study of finite size effects on the physical properties of nanostructural polymer systems such as: thin films, polymer composites and copolymers. The micromechanical properties derived from nanoindentation will be compared to the values associated to the bulk.

Nanocompuestos basados en polímeros termoplásticos reversiblemente entrecruzados. Propiedades dieléctricas.

Code or referente: I-COOP0123.

Funding Institution: Programa “CSIC para el desarrollo”, CSIC.

Main researcher: María Esperanza Cagiao Escotado.

Duration: 1st July 2011-30th June 2013.

Objectives: Study of the dielectric properties of nanocomposites based on reversibly crosslinked thermoplastic polymers (PET, PEN, PMMA and PVDF) with different additives: clay, graphite, etc.

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.

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

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

Code or Reference: MAT2011-23455.

Funding Institution: Ministerio de Ciencia e Innovación.

Main Researcher: Mari Cruz García-Gutiérrez.

Duration: January 2012-December 2014.

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

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

Code or Reference: RYC-2011-09585.

Funding Institution: MICINN.

Main Researcher: Javier Ramos Díaz.

Duration: January 2012-December 2013.

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

Density fluctuation dynamics in diblock copolymers.

Code or Reference: I-20110191 EC.

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

Main Researcher: Alejandro Sanz Parras.

Duration: June 2011-June 2012.

Objectives: Studies on the dynamics of each phase in a block copolymer prior to phase separation.

PROYECTOS CON LA INDUSTRIA / PROJECTS WITH THE INDUSTRIAL COMPANIES

Cenit Infnitex: 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-. March 2013

Study of the effects of molecular composition on the melt and solid state properties of polyolefinic blends.

Company: Dow Chemicals Ibérica.

Main Researcher: Javier Martínez de Salazar Bascuñana.

Duration: Mayo 2011- Abril 2012.

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

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

IV Jerte Advanced Relativity Meeting. Navaconcejo (Cáceres). 27th-30th of March 2012.

- *Criteria for the Determination of a Unique Fock Quantization of Scalar Fields* (Oral contribution), G.A. Mena Marugán.
- *Black Holes... To Be, or not To Be, That Is the Question* (Oral contribution), L.J. Garay.
- *Removing the Ambiguity in the Fock Quantization of Cosmological Perturbations* (Oral contribution) M.Fernández-Méndez.
- *Fock Quantization with Unitary Evolution of a Massless Scalar Field Propagating in de Sitter Spacetime* (Oral contribution), J. Cortez, D.Martín-de Blas, G.A. Mena Marugán and J.M. Velhinho.
- *Complete Hybrid Quantization of an Inflationary Universe with Inhomogeneities* (Oral contribution), M. Fernández-Méndez, J. Olmedo and G.A. Mena Marugán.

Nonlinear transport, dynamics and fluctuations in condensed matter physics. Madrid, 20th-22nd of November 2012.

- *Time-dependent wave packet simulations of transport through Aharonov-Bohm interferometers.* (Invited talk), R.A. Molina.

4.1.2 DPTO. DE ESPECTROSCOPIA NUCLEAR, VIBRACIONAL Y MATERIA DESORDENADA / NUCLEAR, VIBRATIONAL AND DESORDERED MEDIA SPECTROSCOPY

XII Congreso Nacional de Materiales, Iberomat, Alicante, 30th of May - 1st of June 2012.

- *Caracterización de los productos de corrosión del acero embebido en morteros de ceniza volante mediante Espectroscopía Raman* (Oral presentation), M. Criado, S. Martínez-Ramirez, S. Fajardo, J. M. Bastidas.
- *Influencia de la relación agua/sólido en la hidratación del silicato tricálcico* (Póster), I.F. Sáez del Bosque, S. Martínez-Ramírez and M.T. Blanco-Varela.

VI Reunión de la Sociedad Española de Técnicas Neutrónicas, Segovia, 24th-27th of June 2012.

- *Atrapado de Hidrógeno Molecular en Nanocuernos de Carbón Oxidados* (Póster), C. Cabrillo, F. Fernández-Alonso, R. Fernández-Perea, F.J. Bermejo, I. Bustinduy, M. A. González, C. Mondelli and M. L. Saboungi.

X Reunión Nacional de Óptica, Zaragoza 4th-7th of September 2012.

- *Nanopartículas plasmónicas de altas prestaciones para la detección molecular mediante Surface-enhanced Raman Scattering* (Póster), S. Sánchez-Cortés, I. Izquierdo-Lorenzo, A. Garcia-Leis and J.V. Garcia-Ramos.
- *Caracterización espectroscópica de los fármacos indometacina y ketorolac en disolución acuosa* (Póster), P. Sevilla, E. Corda, M. Hernandez, J.V. Garcia-Ramos and C. Domingo. **(Together with FM)**
- *Fluorescencia intensificada por nanopartículas de plata (SEF) del fármaco antitumoral emodina en una matriz de silicio poroso* (Oral presentation), M. Hernandez, G. Recio, R.J. Martín-Palma and J.V. García-Ramos, C. Domingo and P. Sevilla. **(Together with FM)**
- *Estructura y propiedades ópticas de vidrios de fluoroteluritos dopados con Er para aplicaciones fotónicas* (Oral presentation), R. Morea, M. Hernández, A. Miguel, F.J. Ferrer, J. Gonzalo, C. Domingo, J. García-Lopez, J. Fernández and R. Balda. **(Together with FM)**

XXIII Reunión Nacional de Espectroscopía y VII Congreso Ibérico de Espectroscopía, Córdoba, 17th-20th of September 2012.

- *Estrategias para la detección de sustancias de dopaje en el deporte mediante Espectroscopía Raman intensificada en superficies (SERS)* (Póster), J.V. García-Ramos, I. Izquierdo-Lorenzo and S. Sánchez-Cortés.
- *Study of the adsorption of the neonicotinoid pesticide Thiocloprid on metallic nanoparticles by Surface-enhanced Raman Spectroscopy* (Póster), M.V. Cañamares and A. Feis.
- *Optical emission spectroscopy of the plasma plume of CO₂ laser ablation of adenine and guanine bases* (Póster), L. Díaz and J. J. Camacho, L. Rubio.
- *Aplicación de técnicas espectroscópicas al estudio de aditivos naturales y artificiales en morteros del Patrimonio* (Póster), A. Tendero, S. Martínez-Ramirez and M.V. Cañamares.
- *Fluorescencia intensificada por nanopartículas de plata (SEF) del fármaco antitumoral emodina en una matriz de silicio poroso* (Póster), P. Sevilla, M. Hernández, G. Recio, R.J. Martín-Palma, J.V. García-Ramos and C. Domingo. **(Together with FM)**
- *Caracterización espectroscópica de los fármacos indometacina y ketorolac en disolución acuosa* (Póster) E. Corda, P. Sevilla, M. Hernández, J.V. García-Ramos and C. Domingo. **(Together with FM)**
- *Plasmonic Fano resonances on metal nanorods for sensing applications* (Oral presentation), F. López-Tejeira, R. Paniagua-Domínguez, R. Rodríguez-Oliveros, and J.A. Sánchez-Gil.
- *Temporal characterization of the induced plasma emission during the nanosecond ablation of Lithium Fluoride* (Póster), J.J. Camacho, L. Díaz, J.P. Cid and J.M.L. Poyato.
- *Temporally resolved laser induced plasma diagnostic of CaO* (Póster), P. Cid, J. J. Camacho, L. Díaz and J.M.L. Poyato.

Conferencia Española de Nanofotónica, Carmona, 1st-4th of October 2012.

- *Parabolic antennae at telecommunication infrared wavelengths* (Póster), L. Froufe-Pérez, R. Paniagua-Domínguez, and J. A. Sánchez-Gil.
- *Exotic optical properties of metallo-dielectric core-shell nanospheres and nanowires. Application to negative refraction* (Oral presentation), R. Paniagua-Domínguez, D. R. Abujetas, F. López-Tejeira, L. Froufe-Pérez, R. Marqués, and J. A. Sánchez-Gil.
- *Plasmonic Fano resonances on single nanorods: Application to refractive index sensing* (Póster), F. López-Tejeira, R. Paniagua-Domínguez, R. Rodríguez-Oliveros, and J. A. Sánchez-Gil.
- *Light emission statistics in correlated random photonic nanostructures* (Oral presentation), N. de Sousa, J. J. Sáenz, A. García Martín, and L.S. Froufe Pérez.
- *Negative scattering asymmetry parameter for dipolar particles: Unusual reduction of the transport mean free path and radiation pressure* (Oral presentation), R. Gómez-Medina, L. S. Froufe-Pérez, M. Yépez, F. Scheffold, M. Nieto-Vesperinas, J. J. Sáenz, and A. García Martín.
- *Raman Ultra-sensible sobre Nanoestrellas Plasmónicas* (Oral presentation) A. Garcia-Leis and S. Sánchez-Cortés.

6th Annual Conference CIBER-BBN, Madrid, 19th-20th of November 2012.

- *Molecular characterization of drug nanocarriers based on Plasmon Enhanced spectroscopies: fluorescence (SEF) and Raman (SERS)* (Póster), P. Sevilla, M. Hernández, E. Corda, José V. García-Ramos and C.Domingo. **(Together with FM)**

4.1.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS

X Reunión Nacional de Óptica. Zaragoza 4th-7th of September 2012.

- *Fluorescencia intensificada por nanopartículas de plata (SEF) del fármaco antitumoral emodina en una matriz de silicio poroso* (Oral presentation) M. Hernández, G. Recio, R.J. Martín-Palma, J.V. García-Ramos and C. Domingo and P. Sevilla. **(Together with ENVMD)**
- *Caracterización espectroscópica de los fármacos indometacina y ketorolac en disolución acuosa* (Póster) P. Sevilla, E. Corda, M. Hernández, J.V. García-Ramos and C. Domingo. **(Together with ENVMD)**

XXIII Reunión Nacional de Espectroscopía. VII Congreso Ibérico de Espectroscopía. Córdoba 17th-20th of September 2012.

- *Fluorescencia intensificada por nanoparticulas de plata (SEF) del fármaco antitumoral emodina en una matriz de silicio poroso* (Póster) P. Sevilla, M. Hernández, G. Recio, R.J. Martín-Palma, J.V. García-Ramos and C. Domingo. **(Together with ENVMD)**
- *Caracterización espectroscópica de los fármacos indometacina y ketorolac en disolución acuosa* (Póster) E. Corda, P. Sevilla, M. Hernández, J.V. García-Ramos and C. Domingo. **(Together with ENVMD)**

2nd National Conference on Laboratory and Molecular Astrophysics, Sevilla, 14th-16th of November 2012.

- *Amorphous CO₂ ice* (Invited talk), R. Escribano, G. Muñoz-Caro, G.A. Cruz-Díaz, Y. Rodríguez-Lazcano and B. Maté.
- *Inelastic H₂O: He Collision Rates between 20 and 100 K as Obtained in the Laboratory* (Invited talk), S. Montero, G. Tejada, and J. M. Fernández.
- *Cold Plasmas and Application to Astrophysics* (Invited talk), V. J. Herrero, I. Tanarro, E. Carrasco and M. Jiménez-Redondo.
- *Vibration-rotation high resolution laser spectroscopy aimed at laboratory* (Invited talk), J. L. Doménech, M. Cueto, R. Martínez and D. Bermejo.
- *Dynamics of Elementary reactions of astrophysical interest* (Invited talk), F.J. Aoiz, D. Herráez-Aguilar, P. G. Jambina, J. F. Castillo, O. Roncero and V. J. Herrero.
- *Energy distributions of neutrals and ions in H₂ low temperature plasmas* (Póster), I. Tanarro, M. Jiménez-Redondo, E. Carrasco and V. J. Herrero.
- *Infrared spectroscopic signatures in astrophysical ice analogues* (Invited talk), B. Maté, O. Gálvez, Y. Rodríguez-Lazcano, V. J. Herrero and R. Escribano.
- *Spectroscopy studies on amino acids in astrophysical ice analogues* (Invited talk), O. Gálvez, B. Maté, Y. Rodríguez-Lazcano, V. J. Herrero, I. Tanarro and R. Escribano.
- *Theoretical study of the reaction of S⁺ with vibrationally excited H₂* (Póster), A. Zanchet, O. Roncero, A. Aguado and M. Agúndez.

6th Annual Conference CIBER-BBN, Madrid, 19th-20th of November 2012.

- *Molecular characterization of drug nanocarriers based on Plasmon Enhanced spectroscopies: fluorescence (SEF) and Raman (SERS)* (Póster), P. Sevilla, M. Hernández, E. Corda, José V. García-Ramos and C. Domingo. **(Together with ENVMD)**

4.1.4 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

VI Reunión de la Sociedad Española de Técnicas Neutrónicas, Segovia (Spain), 25th-27th of June 2012.

- *Dinámica confinada en poli (etilén tereftalato) semicristalino: Dispersión Causielástica de Neutrones* (Póster), A. Sanz Parras.

4.2 CONGRESOS Y REUNIONES INTERNACIONALES / INTERNATIONAL CONGRESSES AND MEETINGS

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

RSME-SMM-2012. II Encuentro Conjunto Real Sociedad Matemática Española y Sociedad Matemática Mexicana, Torremolinos (Málaga), 17th -20th of January 2012.

- o *Unicidad de la Cuantización de Fock para Campos en Espaciotiempos no Estacionarios* (Invited talk), G.A. Mena Marugán.

6th International Workshop on Shape-Phase Transitions and Critical Point Phenomena in Nuclei, Darmstadt (Germany), 14th -18th of February 2012.

- *The Richardson-Gaudin Hyperbolic model: Exact solutions for p-wave spinless fermions and heavy nuclei* (Invited talk), J. Dukelsky.

APS March Meeting 2012, Boston (USA), 27th of February-2nd of March 2012.

- *Non-Abelian gauge potentials in graphene bilayers* (Oral contribution), J. González, P. San-José and F. Guinea

Workshop on Symmetry and Quantum Physics, Granada (Spain), 11th -13th of April 2012.

- *Non-differentiable paths and quantum mechanics: the Takagi function* (Invited talk), J. F. Barbero González.

Anharmonicity in medium-sized molecules and clusters, Paris (France), 18th of April 2012.

- *Theoretical Infrared and Raman spectra of 13C-Dimethyl Ether (¹³CH₃OCH₃) based on ab initio calculations* (Invited talk), M. Carvajal, M.L. Senent, O. Álvarez-Bajo, R. Domínguez-Gómez and M. Villa.
- *Structure and electronic spectra of the C₆⁻ anion* (Póster), D. Hammoutene, M. Hochlaf and M.L. Senent.
- *Electronic structure of the [MgO₃]⁺ cation* (Póster), A. Ben Houria, O. Yazidi, N. Jaidane, M.L. Senent and M. Hochlaf.

Beauty in Physics: Theory and Experiment, Cocoyoc (Mexico), 14th -18th of May 2012.

- *New realizations of the Richardson-Gaudin models in nuclear physics and condensed matter: The Hyperbolic model* (Invited talk), J. Dukelsky.

III Oficina de Teoria Quântica de Campos do Nordeste, Salvador de Bahía (Brasil). 23rd -25th of May 2012.

- *Criteria for a Unique Fock Quantization of Scalar Fields* (Invited talk), G.A. Mena Marugán.

220th American Astronomical Society Meeting, Anchorage (USA), 10th of June 2012.

- *Formation of interstellar anions* (Póster), M.L.Senent.

NORDITA Workshop on Non-locality: Aspects and Consequences, Stockholm (Sweden), 27th of June 2012.

- *Real Clocks: A Toy Model for Non-Locality* (Invited talk), L.J. Garay.

13th Marcel Grossmann Meeting on General Relativity, Stockholm (Sweden), 1st -7th of July 2012.

- *Quantization of the Massless Scalar Field in de Sitter Space with Unitary Dynamics* (Oral contribution), J.M. Velhinho, J.Cortez, D.Martín-de Blas and G.A. Mena Marugán.
- *Uniqueness of the Fock Quantization of Scalar Fields with Time Dependent Mass* (Oral contribution), J. M. Velhinho, L. Castelló Gomar, J. Cortez, M. Fernández-Méndez, D. Martín-de Blas, G.A. Mena Marugán and J. Olmedo.
- *Hybrid Quantization of an Inhomogeneous Inflationary Scenario* (Oral contribution), M. Fernández-Méndez, G.A. Mena Marugán and J. Olmedo.
- *Approximated Quantum Solutions in Inhomogeneous Loop Quantum Cosmology* (Oral contribution), D. Martín-de Blas, M. Martín-Benito and G.A. Mena Marugán.
- *The thermodynamic limit for black holes in Loop Quantum Gravity* (Oral contribution), J.F. Barbero González and E.J.S. Villaseñor.

Nuclear Structure and Dynamics, Opatija (Croatia), 9th-13th of July 2012.

- *Nuclear Shape transitions in neutron-rich medium-mass nuclei* (Oral contribution), P. Sarriguren, R.R. Rodríguez-Guzmán and L.M. Robledo.

3-Quantum: Algebra, Geometry, Information, Tallin (Estonia), 10th -14th of July 2012.

- *The thermodynamic limit for black holes in Loop Quantum Gravity* (Oral contribution), J.F. Barbero González.

International Conference on Mathematical Modeling in Physical Sciences, Budapest (Hungary), 3rd-7th of September 2012.

- *Unitary Evolution and Uniqueness of the Fock Quantization in Flat Cosmologies* (Invited talk), G.A. Mena Marugán, D. Martín-de Blas and L. Castelló Gomar.

Spanish Relativity Meeting in Portugal ERE2012, Guimarães (Portugal), 3rd -7th of September 2012.

- *Complete Quantization of Scalar Cosmological Perturbations* (Oral contribution), M. Fernández-Méndez, G.A. Mena Marugán and Javier Olmedo.
- *Inhomogeneous Loop Quantum Cosmology, Hybrid Quantization and Approximated Solutions* (Oral contribution) D. Martín-de Blas, M. Martín-Benito and G.A. Mena Marugán.
- *The Holographic Ricci Dark Energy and Its Possible Doomsdays* (Oral contribution), M. Hicham Belkacemi, M. Bouhmadi-López, A. Errahmani and T. Ouali.

International Scientific Meeting on Nuclear Physics Rábida 12, La Rábida (Spain), 8th-14th of September 2012.

- *Active and Sterile Neutrino Mass Effects on Beta Decay Spectra* (Oral contribution), J. M. Boillos Betete, O. Moreno Díaz and E. Moya de Guerra.

2nd European Nuclear Physics Conference 2012, Bucarest (Romania), 17th -21st of September 2012.

- *Electroweak Processes in Nuclei* (Invited keynote talk), O. Moreno Díaz.

Open Quantum Systems: From Atomic Nuclei to Quantum Optics, Trento (Italy), 24th-28th of September 2012.

- *Continuum states with integral relations: The helium trimer with soft-core potentials* (Invited talk), E. Garrido.

Nanoscience and Nanotechnology 2012, Frascati (Italy), 1st-4th of October 2012.

- *Confinement of charge by pseudomagnetic fields in graphene* (Invited talk), J. González.

3rd International Symposium of Theoretical Chemistry (ISTC 2012), Argel (Argelia), 5th of October 2012.

- *Formation of interstellar anions* (Invited talk), M.L.Senent.

Correlations and coherence in quantum systems, Evora (Portugal), 8th -12th of October 2012.

- *Integrable pairing models in mesoscopic physics* (Invited talk), J. Dukelsky.

FisEs'12, Palma de Mallorca (Spain), 18th -20th of October 2012.

- *Topological effects on the KPZ universality class* (Póster), J. Rodríguez-Laguna.

4th International Conference on Collective Motion in Nuclei under Extreme Conditions, COMEX4, Shonan Village Center, (Japan), 22nd-26th of October 2012.

- *Decay properties of medium-mass neutron-deficient nuclei involved in the rp-process* (Oral contribution), P. Sarriguren.

Quantum Simulators, Bilbao (Spain), 22nd -26th of October 2012.

- *Simulating quantum matter near event horizons* (Oral contribution), J. Rodríguez-Laguna.

Perspectives of Fundamental Cosmology, Stockholm (Sweden), 5th-30th of November 2012.

- *Introduction to Multifractal Spacetimes – Part I and II* (Plenary speaker), G. Calcagni.

2ND National conference on laboratory and molecular astrophysics, Madrid (Spain), 14th of November 2012.

- *Low frequency modes of methyl acetate* (Oral contribution), M.L. Senent, M. Carvajal, I. Kleiner and R. Domínguez-Gómez.
- *Molecular characterization and interstellar identification of molecular species with large amplitude torsional modes* (Oral contribution), M.Carvajal, I.Kleiner, M.L.Senent, R.Dominguez-Gómez, I.Haykal, L.Margules, R.A. Motiyenko, T.Huet, B.Tercero and J.Cernicharo.

Asia Pacific Cosmology and Astroparticle Physics Meeting, Taipei (Taiwan), 14th -17th of November 2012.

- *Dark Energy as a Holographic Ricci Component of the Universe* (Invited talk), M. Hicham Belkacemi, M. Bouhmadi-López, A. Errahmani and T. Ouali.

ESF Research Conference on Cold and Ultracold molecules, Universitätszentrum Obergurgl (Austria), 18th -22th of November 2012.

- *Measurement and control of cold molecular ions and polar molecules* (Póster), J. Mur-Petit and J. J. García-Ripoll.

Physique e chimie du milieu interstellaire, PCMI, Paris (France), 19th of November 2012.

- *Internal rotation in astrophysical or prebiotic molecules* (Póster), I. Kleiner, M. Carvajal, H. V. L. Nguyen and M-L. Senent.

CDT & Friends, Nijmegen (The Netherlands), 11th of December 2012.

- *Field Theory on Multifractal Spacetimes* (Plenary speaker), G. Calcagni.

4.2.2 DPTO. DE ESPECTROSCOPIA NUCLEAR, VIBRACIONAL Y MATERIA DESORDENADA / NUCLEAR, VIBRATIONAL AND DESORDERED MEDIA SPECTROSCOPY

Astrophysics with modern small-scale accelerators, Bonn (Germany), 6th-10th of February 2012.

- *4He ($3\text{He}, \gamma$) 7Be cross section at $ECM = 900 - 2800$ keV measured at a 5 MeV tandem accelerator* (Oral contribution), M. Carmona.

Topical workshop on Modern Aspects in Nuclear Structure, Bornio (Italy), 22nd -25th of February 2012.

- *The gamma proton calorimeter for R3B* (Oral contribution), O. Tengblad.

GANAS -Gamma detection with New Advanced Scintillators-Kick-off Meeting, Bornio (Italy), 22nd of February 2012.

- *The Ganas project* (Oral contribution), O. Tengblad.
- *Participation of IEM at the "GANAS project"* (Oral contribution), E. Nácher.

NANOSPAIN Conference 2012, Santander (Spain), 27th of February-1st of March 2012.

- *Single nanoparticle Plasmonics: Shape matters* (Keynote contribution), J.A. Sánchez-Gil.
- *Plasmonic Fano resonances become single-particle* (Oral contribution), F. López-Tejiera, R. Paniagua-Domínguez, R. Rodríguez-Oliveros, and J.A. Sánchez-Gil.

International Collaboration on Advanced Neutron Sources, ICANS XX, Bariloche, (Argentina), 4th-9th of March 2012.

- *ESS-Bilbao Accelerator: Progress Report* (Oral contribution), F.J. Bermejo, I. Bustinduy, F. García-Toriello, F. Sordo, I Rueda and S. Terrón.
- *Design of a 300kW proton Beam Dump for ESS-Bilbao* (Póster), F. Martínez, M. Magán, S. Terrón, J.P. De Vicente, A. Ghigolino, F. Sordo, R. Vivanco, F.J Bermejo and J. M. Perlado (IFN-UPM).
- *The Neutronic Applications Laboratory for ESS-Bilbao* (Oral contribution), F. Sordo, S. Terrón, M. Magán, A. Ghigolino, F. Martínez, F.J. Bermejo and J.M. Perlado (IFN-UPM).
- *ESS-Bilbao Beryllium rotating target design* (Oral contribution), S. Terrón, F. Sordo, M. Magán, A. Ghigolino, F. Martínez, P.J. De Vicente, R. Vivanco, F.J. Bermejo and J.M. Perlado (IFN-UPM).

MINIBALL Workshop, Cologne (Germany), 5th-6th of March 2012.

- *Transient field g-factor measurements at REX-ISOLDE* (Invited talk), A. Jungclaus.

- 27th International Conference of Alzheimer's Disease International**, London (England), 7th-10th of March 2012.
- *Infrared spectra of peripheral mononuclear leukocytes as a tool for Alzheimer disease diagnostics* (Póster), P. Carmona, A. Toledano, I. Álvarez, S. Ruiz, A. Feliu, M. Molina, M. Calero, P. Martínez and F. Bermejo.
- PSST-2012, Porous Semiconductors - Science and Technology Conference**, Málaga (Spain), 25th-29th of March 2012.
- *Fluorescence characterization of a drug delivery system based on a nanostructured porous silicon matrix loaded with the anti-tumoral drug emodin adsorbed on silver nanoparticles* (Póster), M. Hernandez, G. Recio, R.J. Martín-Palma, V. Torres, J.V. García-Ramos, C. Domingo and P. Sevilla. **(Together with FM)**
- 10th Biennial International Conference of the Infrared and Raman Users Group (IRUG 10)**, Barcelona (Spain), 28th-31st of March 2012.
- *Study of a 3rd generation commercial cements superplasticizer by spectroscopic techniques: Surface-Enhanced Raman Spectroscopy (SERS) study of a commercial polycarboxylate cement superplasticizer* (Póster), M.V. Cañamares, S. Martínez-Ramírez and S. Sánchez-Cortés.
- 3rd International Conference on Metamaterials, Photonic Crystals and Plasmonics (META'12)**, Paris (France), 18th-22nd of April 2012.
- *Optical properties of metallo-dielectric nanospheres and their application to three-dimensional, isotropic, optical metamaterials* (Invited talk), R. Paniagua-Domínguez, F. López-Tejiera, L. Froufe-Pérez, R. Marqués and J.A. Sánchez-Gil.
- European Geosciences Union General Assembly 2012, EGU 2012**, Viena (Austria), 22nd-27th of April 2012.
- *Scaling on a limestone flooring* (Póster), P. Carmona-Quiroga, M.T. Blanco-Varela and S. Martínez-Ramírez.
- Workshop on detailed spectroscopy studies at ISOL@MYRRHA**, Leuven (Belgium), 23th-25th of April 2012.
- *Beta-delayed particle emission: present and future perspectives* (Invited talk), M.J.G. Borge.
- E-MRS 2012 Spring Meeting**, Strasbourg (France), 14th-18th of May 2012.
- *Gold coated polymeric laser induced periodic surface structures as substrates for Surface-Enhanced Raman Scattering (SERS)* (Póster), E. Rebolgar, S. Pérez, M. Hernandez, M. Sanz, I. Martín-Fabiani, D.R. Rueda, T.A. Ezquerro, C. Domingo and M. Castillejo. **(Together with FM)**
- The 3rd International Particle Accelerator Conference, IPAC'12**, New Orleans, Louisiana (USA), 20th-25th of May 2012.
- *Design and Measurements of a Test Stand for the Sem-Grid System of the ESS- Bilbao* (Oral contribution), D. Belver, F.J. Bermejo, J. Feuchtwanger P.J. González, V. Etxebarria and J. Jugo.
 - *Design and Measurements of the Stripline BPM System of the ESS- Bilbao* (Oral contribution), D. Belver, F.J. Bermejo, J. Feuchtwanger, N. Garmendia, P.J. González, L. Muguirra, S. Varnasseri, V. Etxebarria, J. Jugo and J. Portilla.
 - *Status of the Ion Sources at ESS-Bilbao* (Póster), J. Feuchtwanger, I. Arredondo, F.J. Bermejo, I. Bustinduy, J.L. Muñoz, J. Corres, M. Eguiraun, P.J. González, R. Miracoli, V. Etxebarria, J. Jugo and J. Portilla.
 - *Complete Electromagnetic Design of the ESS-Bilbao RFQ Cold Model*, (Póster), A. Vélez, O. González, J.L. Muñoz, D. de Cos, I. Madariaga, N. Garmendia, J. Feuchtwanger, I. Bustinduy, F.J. Bermejo, J. Portilla and V. Etxebarria.
- European Materials Research Society (E-MRS 2012 Spring Meeting)**, Strasbourg, (France) 27th-31th of May of 2012.
- *Pulsed Laser induced formation of Si-nanocrystals by irradiation of bulk SiO targets* (Póster), M. Martín, I. López-Quintás, M. Jadraque, L.M. Díaz Sol, A.B. Evtushenko, Y.G. Shukhov and A.V. Bulgakov.

II Congresso Nazionale di Spettroscopia Raman ed Effetti Ottici Non Lineari, Bologna (Italy) 6th-8th of June 2012.

- *Strategies for the detection of sport doping drugs using Surface-Enhanced Raman Scattering* (Oral contribution), S. Sánchez-Cortés.

Nobel Symposium NS 152 – Physics with Radioactive Beams, Gothenburg (Sweden), 10th-15th of June 2012.

- *Beta-delayed particle emission: peering into nuclear structure* (Invited talk), M.J.G. Borge.

XV International Symposium on Luminiscence Spectrometry (ISLS 2012), Barcelona, 19th-22nd of June 2012.

- *Effect of the Localized Surface Plasmon of silver nanoparticles on fluorescence spectroscopy of drugs emodin and piroxicam* (Oral contribution), P. Sevilla, M. Hernández, E. Corda, J.V. García-Ramos and C. Domingo. **(Together with FM)**

The 3rd Meeting of The Union for Compact Accelerator-driven Neutron Sources, UCANS-III, Bilbao (Spain), 31st of July- 3rd of August 2012.

- *The ESS Bilbao accelerator* (Oral contribution), I. Bustinduy, F.J. Bermejo.
- *Electromagnetic design of ESS-Bilbao linac accelerating structures* (Póster), J.L. Muñoz, I. Bustinduy, A. Vlez, D. de Cos and F.J. Bermejo.

XXIII International Conference on Raman Spectroscopy, Bangalore (India), 12th-17th of August 2012.

- *Molecular spectroscopic characterization of the non-steroidal anti-inflammatory drugs indomethacin and ketorolac in solution* (Póster), P. Sevilla, M. Hernandez, E. Corda, J.V. García-Ramos and C. Domingo. **(Together with FM)**
- *Strategies for the detection of sport doping drugs using Surface-Enhanced Raman Scattering* (Póster), J.V. García-Ramos, I. Izquierdo-Lorenzo and S. Sánchez-Cortés.
- *Electrochemical SERS study on a copper electrode of the insoluble organic pigment Quinacridone Quinone using ionic liquids as dispersive agents* (Póster), E. del Puerto, C. Domingo, S. Sánchez-Cortés and V. García-Ramos. **(Together with FM)**
- *SERS detection of diquat and paraquat herbicides based on curcubit [8] uril functionalized silver nanoparticles* (Póster), M.L. Roldán, S. Sánchez-Cortés, C. Domingo and J. V. García-Ramos. **(Together with FM)**
- *Old coated polymeric laser induced periodic surface structures as substrates for Surface-Enhanced Raman Scattering (SERS)* (Póster), E. Rebollar, S. Pérez, M. Hernandez, M. Sanz, I. Martín-Fabiani, D.R. Rueda, T.A. Ezquerro, C. Domingo and M. Castillejo. **(Together with FM)**

Near Field Optics (NFO-12), San Sebastián (Spain), 3rd-7th of September of 2012.

- *Plasmonic Fano resonances become single-particle* (Oral contribution), F. López-Tejiera, R. Paniagua-Domínguez, R. Rodríguez-Oliveros, and J.A. Sánchez-Gil.
- *Metal nanostars in SERS & Optical Heating* (Póster), R. Rodríguez-Oliveros and J.A. Sánchez-Gil.
- *Light emission statistics as a local probe for structural phase switching* (Póster), N. de Sousa, J.J. Sáenz, A. García Martín and L.S. Froufe-Pérez.
- *3D isotropic optical NIMs from metallo-dielectric core-shell nanospheres* (Póster), R. Paniagua-Domínguez, F. López-Tejiera, R. Marqués, R. Rodríguez-Oliveros and J.A. Sánchez-Gil.

International Summer School on Nuclear Physics "Basic concepts in Nuclear Physics: theory, experiments and applications", Huelva (Spain), 9th-13rd of September 2012.

- *Phoswich Scintillator for high energy gamma radiation and proton detection* (Oral contribution), José Sánchez del Río.

Euroschool on Exotic Beams, Athens (Greece), 9th-15th of September 2012.

- *Astrophysical factor for the $^4\text{He}(3\text{He},\gamma) ^7\text{Be}$ reaction at medium energies* (Oral contribution), Mariano Carmona.

13th Trends in Nanotechnology International Conference (TNT2012), Madrid, 10th-14th of September 2012.

- *Light emission statistics as a local probe for structural phase switching* (Oral contribution), L.S. Froufe-Pérez, N. de Sousa, J.J. Sáenz and A. García Martín.
- *Fluorescence and Raman characterization of a transport system formed by the anti tumoral drug emodin, silver nanoparticles and porous silicon* (Oral contribution), P. Sevilla, M. Hernandez, G. Recio, E. Corda, R.J. Martín-Palma, J.V. García-Ramos and C. Domingo. **(Together with FM)**
- *Refractive Index Sensing based on Plasmonic Fano-like Interference* (Oral contribution), F. López-Tejiera, R. Paniagua-Domínguez and J.A. Sánchez-Gil.
- *Negative scattering asymmetry parameter for dipolar particles: Unusual reduction of the transport mean free path and radiation pressure* (Oral contribution), R. Gómez-Medina, L.S. Froufe-Pérez, M. Yépez, F. Scheffold, M. Nieto-Vesperinas, J.J. Sáenz and A. García Martín.

R3B Workshop 2012, Darmstadt (Germany), 11th of September 2012.

- *Studying neutron-rich nuclei beyond the dripline* (Oral contribution), G. Ribeiro Jiménez.

VII Encuentros de Física Nuclear, Huelva (Spain), 14-16th of September 2012.

- *Phoswich Scintillator for high energy gamma radiation and proton detection* (Oral contribution), José Sánchez del Río.

The 52nd ICFA Advanced Beam Dynamics Workshop on High Intensity and High Brightness Hadron Beams HB2012, Beijing, (China), 17th-21st of September 2012.

- *Medium Energy Beam Transport Design Update for ESS* (Póster), I. Bustinduy, F.J. Bermejo, A. Ghiglini, O. González, J.L. Muñoz, I. Rodríguez, A. Zugazaga, J. Stovall, B. Cheymol, M. Eshraqi and R. Miyamoto.

EOS Annual Meeting 2012 (EOSAM 2012), Aberdeen (Scotland), 25th-28th of September 2012.

- *Light emission statistics in correlated random photonic nanostructures* (Oral contribution), N. de Sousa, J. J. Sáenz, A. García Martín and L.S. Froufe Pérez.

7th International Conference on Laser Induced Breakdown Spectroscopy (LIBS 2012), Luxor (Egipto), 29th-5th of September-October 2012.

- *Temporal Evolution Study of the Plasma Induced by Pulsed Lasers on Targets of Titanium Oxides* (Póster), L. Díaz, J.J. Camacho, M. Sanz, V. Jandova and M. Castillejo.
- *Time-Resolved Study of The Plasma-Plume Emission During The Nanosecond Ablation of Lithium Fluoride* (Póster), J. J. Camacho, L. Díaz, J.P. Cid and J.M.L. Poyato.

First International Beam Instrumentation Conference, IBIC2012, Tsukuba (Japan), 1st-4th of October 2012.

- *Design and Fabrication of the Stripline BPM at ESS-Bilbao* (Póster), S. Varnasseri, I. Arredondo, D. Belver, F.J. Bermejo J. Feuchtwanger, N. Garmendia, P.J. González, L. Muguira, V. Etxebarria, J. Jugo and J. Portilla.

TechnoHeritage- International Congress on Science and Technology for the Conservation of Cultural Heritage, Santiago de Compostela (Spain), 2nd-5th of October 2012.

- *Thaumasite formation in hydraulic mortars: thermodynamic studies* (Póster), M.T. Blanco-Varela, S. Martínez-Ramírez and J. Rapazote.
- *Thermodynamic modelling of sulfo-resistant cements with barium compounds additions* (Oral presentation), P. Carmona-Quiroga, M.T. Blanco-Varela, S. Martínez-Ramírez and B. Lothenbach.
- *Permanent antigraffiti for artificial construction materials: lime mortar and brick* (Póster), P. Carmona-Quiroga, M.T. Blanco-Varela and S. Martínez-Ramírez.
- *Design of gypsum-lime based mortars applied on the restoration of Mudejar Heritage from Aragon (Spain)* (Póster), J. Igea, P. Lapuente, M.T. Blanco-Varela and S. Martínez-Ramírez.

Eurisol Topical and Town Meeting, Lisbon (Portugal), 15th- 19th of October 2012.

- *Influence of the halo structure in the scattering with heavy targets at energies below and around the Coulomb barrier* (Invited talk), M.J.G. Borge.

4ème International Conference sur les techniques nucléaires et conventionnelles et leur application, Rabat (Morocco), 22nd-23rd of October 2012.

- *Strategies for the detection of pollutants and pigments by Surface-Enhanced Raman Scattering* (Plenary lecture), S. Sánchez-Cortés.

10th International Conference on Superplasticizers and other Chemical Admixtures in Concrete, Prague (Czech Republic), 28th-31st of October 2012.

- *Raman Spectroscopy: An appropriate technique for the characterization of superplasticizers* (Oral presentation), M.V. Cañameres, S. Sánchez-Cortés and S. Martínez-Ramírez.

4th Trans Atlantic Fisheries Technology Conference, TAFT 2012, Clearwater Beach, Florida (USA), 30th October-2nd of November 2012.

- *Vibrational spectroscopic analysis of hake (*Merluccius merluccius*, L.) lipids during frozen storage* (Póster), I. Sánchez-Alonso, P. Carmona and M. Careche.
- *Low field nuclear magnetic resonance (LF NMR) spectroscopic analysis of hake (*Merluccius merluccius*, L.) upon freezing. A possibility for authentication of fresh vs thawed muscle* (Oral contribution) I. Sánchez-Alonso, P. Moreno and M. Careche.
- *Kinetic modeling of Kramer shear resistance and water holding capacity of frozen stored hake (*Merluccius merluccius*, L.) muscle* (Oral contribution), M. Careche, J. Sánchez-Valencia, I. Sánchez-Alonso and I. Martínez.
- *Modeling time and temperature history of frozen thawed hake (*Merluccius merluccius*, L.) muscle by low field nuclear magnetic resonance spectroscopy (LF NMR)* (Oral contribution), M. Careche, J. Sánchez-Valencia, I. Sánchez-Alonso and I. Martínez.

8th Iberian Meeting on Computational Electromagnetics, Sesimbra, Lisbon (Portugal), 2nd-4th of November 2011.

- *Electromagnetic Simulation Challenges in the ESS-Bilbao Linac* (Oral contribution), O. González, A. Vélez, J.L. Muñoz, J. Portilla, V. Etxebarria and F.J. Bermejo.

5th International Conference on Fission properties of Neutron-Rich Nuclei, ICFN5, Sanibel Island, Florida(USA), 4th-10th of November 2012.

- *The ISOLDE Facility: Highlights and Future Plans* (Invited talk), M.J.G. Borge.

R3B Meeting Madrid 2012, Madrid (Spain), 11th-14th of December 2012.

- *Status of Phoswich endcap design and simulations* (Oral contribution), J. Sánchez del Río.
- *Implementation of Phoswich in r3broot* (Oral contribution), J. Sánchez del Río.

Isolde Workshop and Users meeting, Geneva (Switzerland), 17th-19th of December 2012.

- *Beta decay studies of the N=Z and waiting point nucleus ⁷²Kr* (Oral contribution), J. Antonio Briz.
- *Magnetic moment measurement in ⁷²Zn using the transient field technique and coulomb excitation in inverse kinematic* (Oral contribution), A. Illana.

31th European Congress on Molecular Spectroscopy, Cluj-Napoca (Romania), 26th-31st of August 2012.

- *Synthesis, spectroscopic, structural and conformational study of some ureas derived from N-methylpiperazine* (Póster), I. Iriepa and J. Bellanato.

4.2.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS

PSST-2012, Porous Semiconductors - Science and Technology Conference, Málaga, 25th-29th of March 2012.

- *Fluorescence characterization of a drug delivery system based on a nanostructured porous silicon matrix loaded with the anti-tumoral drug emodin adsorbed on silver nanoparticles* (Póster), M. Hernández, G. Recio, R. J Martín-Palma, V. Torres, J.V. García-Ramos, C. Domingo and P. Sevilla. **(Together with ENVMD)**
- *Evaluation of the hydrogen content in carbon microfibers* (Póster), A. Madroñero, J. Amo, M. Culebras, A. Cantarero, C. Domingo and A. López.

Workshop on “Femto- Astro- Spectro-Ethyne”, Bruselas (Bélgica), 2nd-5th of May, 2012.

- *High resolution Raman spectroscopy of n_2 and associated hot bands of $^{13}C^{12}CH_2$: global analysis of the anharmonic resonances.* (Oral contribution) D. Bermejo.

E-MRS 2012 Spring Meeting, Strasbourg (France), 14th-18th of May 2012.

- *Gold coated polymeric laser induced periodic surface structures as substrates for Surface-Enhanced Raman Scattering (SERS)* (Póster), E. Rebollar, S. Pérez, M. Hernandez, M. Sanz, I. Martin-Fabiani, D.R. Rueda, T.A. Ezquerro, C. Domingo and M. Castillejo. **(Together with ENVMD)**

Chemistry and infrared spectroscopy of interstellar dust (summerschool), Cuijk, the Netherlands, 4th-8th of June, 2012.

- *Spectroscopy of cyanate and bicarbonate ions in compact water ice* (Póster), B. Maté, V. J. Herrero, Y. Rodríguez-Lazcano, O. Gálvez and R. Escribano.

1st TEA – IS Summer School, Málaga, 17th-21th of June 2012.

- *Diagnostics of hollow cathode low pressure air discharges as a tool for understanding Halo spectral features in the Earth mesosphere* (Póster), F. C. Parra-Rojas, E. Carrasco, A. Luque, F. J. Gordillo-Vázquez, V. J. Herrero and I. Tanarro.

XV International Symposium on Luminescence Spectrometry (ISLS 2012), Barcelona, 19th-22nd of June 2012.

- *Effect of the Localized Surface Plasmon of silver nanoparticles on fluorescence spectroscopy of drugs emodin and piroxicam* (Oral contribution), P. Sevilla, M. Hernández, E. Corda, J.V. García-Ramos and C. Domingo. **(Together with ENVMD)**

European Week of Astronomy and Space, EWASS 2012, Roma (Italia), 2nd-5th of July 2012.

- *Laboratory study of cyanate and bicarbonate ions under astrophysical conditions* (Póster), R. Escribano, B. Maté, D. Fernández-Torre, O. Gálvez, V.J. Herrero, M.A. Moreno and Y. Rodríguez-Lazcano.
- *Morphology and crystallization kinetics of compact and porous amorphous solid water* (Póster), B. Maté, Y. Rodríguez-Lazcano, R. Escribano and V.J. Herrero.

39th European Physical Society Conference on Plasma Physics & 16th International Congress on Plasma Physics, Stockholm, Sweden, 2nd-6th of July 2012.

- *Chemistry in Low Pressure Cold Plasmas: Ions of Astrophysical Interest* (Invited talk), E. Carrasco, M. Jiménez-Redondo, I. Tanarro and V.J. Herrero.
- *Surface and gas phase processes in dc glow discharges of H_2 / N_2 mixtures. Diagnostics and modelling* (Póster), E. Carrasco, M. Jiménez-Redondo, I. Tanarro and V. J. Herrero.

The 11th ECONOS Conference. Aberdeen, (Reino Unido), 8th-11th of July 2012.

- *High Resolution Stimulated Raman Spectrum of $^{12}C^{13}CH_2$ in the C-C stretching region* (Póster), D. Bermejo, R.Z. Martínez, G. DiLorenzo and L. Fusina.

28th International Symposium on Rarefied Gas Dynamics, Zaragoza (Spain), 9th-13th of July 2012.

- *Diagnostics of H₂O and H₂O+He Supersonic Jets by Raman Spectroscopy* (Invited talk), G. Tejada, J. M. Fernández and S. Montero.
- *Para-Hydrogen Narrow Filament Evaporation at Low Temperature* (Póster), T. G. Elizarova, A. A. Gogolin and S. Montero.
- *Experiments on Microjets of Undercooled Liquid Hydrogen* (Invited talk), J. M. Fernández, M. Kühnel, G. Tejada, A. Kalinin, R. E. Grisenti and S. Montero.
- *Experimental and Numerical Study of Supersonic Jets of N₂, H₂, and N₂ + H₂ Mixtures* (Oral contribution), P. A. Skovorodko, A. Ramos, G. Tejada, J. M. Fernández and S. Montero.
- *Cluster Growth in Supersonic Jets of CO₂ through a Slit Nozzle* (Póster), A. Ramos, G. Tejada, J. M. Fernández and S. Montero.

XXI Europhysics Conference on the Atomic and Molecular Physics of Ionized Gases (ESCAMPIG XXI) Viana do Castelo, Portugal, 10th-14th of July 2012.

- *Energy distributions of neutrals and ions in H₂/D₂ hollow cathode discharges* (Póster), M. Jiménez-Redondo, E. Carrasco, V.J. Herrero and I. Tanarro.
- *Time resolved diagnostics and kinetic modeling of the ignition transient of a H₂+10%N₂ square wave modulated hollow cathode discharge* (Póster), E. Carrasco, M. Jiménez-Redondo, V.J. Herrero and I. Tanarro.

XXIII International Conference on Raman Spectroscopy, Bangalore (India), 12th-17th of August 2012.

- *Electrochemical SERS study on a copper electrode of the insoluble organic pigment Quinacridone Quinone using ionic liquids as dispersive agents* (Póster), E. del Puerto, C. Domingo, S. Sánchez-Cortes and J.V. García-Ramos. **(Together with ENVMD)**
- *Molecular spectroscopic characterization of the non-steroidal anti-inflammatory drugs indomethacin and ketorolac in solution* (Póster), P. Sevilla, M. Hernandez, E. Corda, J. V. García-Ramos and C. Domingo. **(Together with ENVMD)**
- *SERS detection of diquat and paraquat herbicides based on curcubit [8] uril functionalized silver nanoparticles* (Póster), M.L. Roldán, S. Sánchez-Cortes, C. Domingo and J.V. García-Ramos. **(Together with ENVMD)**
- *Gold coated polymeric laser induced periodic surface structures as substrates for Surface-Enhanced Raman Scattering (SERS)* (Póster), E. Rebolgar, S. Pérez, M. Hernandez, M. Sanz, I. Martín-Fabiani, D.R. Rueda, T.A. Ezquerro, C. Domingo and M. Castillejo. **(Together with ENVMD)**

The 22nd International Conference on High resolution Molecular Spectroscopy, Prague (Czech Republic), 4th-8th of September 2012.

- *Continuous-wave stimulated Raman spectroscopy inside a hollow-core photonic crystal fiber* (Oral contribution), J.L. Doménech and M. Cueto.
- *High-resolution stimulated Raman spectroscopy and analysis of the ν_1 and ν_5 bands of C₂H₄*. (Póster presentation), H. Aouididi, M. Rotger, D. Bermejo, R. Z. Martínez and V. Boudon.
- *High Resolution Infrared and Raman Spectroscopy of ¹⁹²OsO₄* (Póster), M. Louviot, V. Boudon, L. Manceron, D. Bermejo and R. Z. Martínez.
- *High-Resolution Stimulated Raman Spectroscopy of Carbon Tetrafluoride CF₄* (Póster), V. Boudon, D. Bermejo and R. Z. Martínez.

European Conference on the Dynamics of Molecular systems, MOLEC 2012. Oxford, UK, 10th-13th of September 2012.

- *Dynamics of the reaction of muonium atoms with hydrogen molecules: Zero point energy, tunnelling and vibrational adiabaticity* (Póster), P. G. Jambrina, R. Pérez de Tudela, E. García, V. J. Herrero, V. Sáez-Rábanos and F.J. Aoiz.

13th Trends in Nanotechnology International Conference (TNT2012), Madrid, 10th-14th of September 2012.

- *Fluorescence and Raman characterization of a transport system formed by the anti tumoral drug emodin, silver nanoparticles and porous silicon* (Oral contribution), P. Sevilla, M. Hernandez, G. Recio, E. Corda, R.J. Martín-Palma, J.V. García-Ramos and C. Domingo. (**Together with ENVMD**)

XXIII Reunión Nacional de Espectroscopía (XXIII RNE) - VII Congreso Iberico de Espectroscopia (VII CIE), Córdoba, 17th-20th of September 2012.

- *Amorphous solid CO₂: a spectroscopic study* (Póster), R. Escribano, G. M. Muñoz Caro, B. Maté, G. A. Cruz Diaz and Y. Rodríguez Lazcano.
- *Infrared signatures of cyanate and bicarbonate ions in compact amorphous solid wáter* (Póster), B. Maté, Y. Rodríguez-Lazcano, D. Fernández-Torre, M. A. Moreno, V. J. Herrero and R. Escribano.
- *Spectroscopies properties of solid glycine and alanine in environments of astrophysical relevance*, (Póster) Y. Rodríguez-Lazcano, B. Maté, O. Gálvez, I. Tanarro, V. Herrero and R. Escribano.
- *Spectroscopy studies on astrophysical ices* (Invited talk), O. Gálvez, B. Maté, Y. Rodríguez-Lazcano, V.J. Herrero and R. Escribano.
- *Emission spectroscopy and mass spectrometry of H₂/D₂ hollow cathode glow discharges: Energy distributions of neutrals and ions* (Póster), M. Jiménez-Redondo, E. Carrasco, V.J. Herrero and I. Tanarro.
- *Spectroscopic diagnostics of low pressure hollow cathode air discharges as a tool for the understanding of Halo spectral features in the Earth mesosphere* (Póster), F. C. Parra-Rojas, E. Carrasco, A. Luque, F. J. Gordillo-Vázquez, V. J. Herrero and I. Tanarro.

European Planetary Science Congress 2012, Madrid, 23rd-28th of September 2012.

- *IR spectroscopic signatures of solid glycine and alanine in astrophysical ices* (Póster), Y. Rodríguez-Lazcano, B. Maté, Ó. Gálvez, I. Tanarro, V. J. Herrero and R. Escribano.
- *Ammonia-water ices: spectroscopic signatures in the near infrared* (Póster), R. Escribano, B. Maté, Y. Rodríguez-Lazcano, O. Gálvez and V.J. Herrero.
- *A comparative study of the porosity and crystallization kinetics of compact and porous water ice* (Póster), B. Maté, Y. Rodríguez-Lazcano and V.J. Herrero.

International Congress on Science and Technology for the Conservation of Cultural Heritage, Santiago de Compostela, 2nd-5^h of October 2012.

- *Effect of wavelength and pulse duration on the laser cleaning of paints* (Oral contribution), M. Oujja, P. Pouli, M. Sanz, C. Domingo, A. García, C. Romero, J. R. Vázquez de Aldana, P. Moreno, C. Fotakis and M. Castillejo.

17th European Summer School “Low Temperature Plasma Physics: Basics and Applications, Bad Honnef , Germany, 6th-11th of October 2012.

- *Emission spectroscopy and mass spectrometry of H₂/D₂ hollow cathode glow discharges: Energy distributions of neutrals and ions* (Póster), M. Jiménez-Redondo, E. Carrasco, V.J. Herrero, I. Tanarro.

4.2.4 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

HASYLAB Users’ Meeting 2012, Hamburg (Germany), 26th-27th of January 2012.

- *Assessment of nanofabricated structures on polymer thin films: scattering measurements at DESY light sources* (Plenary lecture), T.A. Ezquerro.
<https://indico.desy.de/getFile.py/access?resId=16&materialId=3&confId=5039>

Satellite Meeting ‘Status and Perspectives of Small Angle X-ray Scattering at DESY’, Hamburg (Germany), 26th of January 2012.

- *Dynamics of weakly segregated block copolymers studied by XPCS at the coherence beamline P10* (Invited lecture), A. Nogales.
- *Crystallization of PET and PP in nanolayered confined compacting structures using SAXS* (Invited lecture), Francisco J. Baltá-Calleja, A. Flores and F. Ania.

<https://indico.desy.de/getFile.py/access?resId=14&materialId=3&confId=5039>

New Prospects and Challenges for Science and Education, Marrakech (Morocco), 9th-11th of March 2012.

- *Surface micromechanical properties of polymers and nanocomposites relating to nanostructure* (Invited lecture), F.J. Baltá Calleja, F. Ania and A.Flores.

POLYCHAR 20–World Forum on Advanced Materials, Dubrovnik (Croacia), 26th-30th of March 2012.

- *Development of lamellae in nanolayered PET* (Oral contribution), A. Flores, F. Ania, C. Arribas, A. Ochoa, F.J. Baltá Calleja and E. Baer.
- *Chair of Session – Electrical and Dielectric Properties*, Araceli Flores.
<http://www.polychar20-croatia.com/downloads/PROGRAM-web.pdf> (E13 MARE II, 29 marzo)

5th Synchrotron Radiation in Polymer Science, San Francisco, California (USA), 30th of March-1st of April 2012.

- *Application of GiSAXS to the Evaluation of Polymer Gratings Nanofabricated by Nanoimprint Lithography* (Invited lecture), T.A. Ezquerra, M. Soccio, I. Martín-Fabiani, D.R. Rueda, M.C. García-Gutiérrez, E. Rebollar, N. Alayo and F. Pérez-Murano.
- *Dynamics of Block Copolymers with Lower Disorder-Order Transition as revealed by XPCS* (Invited lecture), A. Nogales, A. Sanz and T.A Ezquerra.
- *X-ray Microdiffraction Study of the Confinement Effects in Polymer Nanoarrays* (Invited lecture), Marl Cruz García-Gutiérrez, A. Linares, I. Martín-Fabiani, D.R. Rueda and T.A. Ezquerra.
- *Laser Induced Periodic Surface Structures on Polymer Thin Films: A Combined GISAXS and AFM Study* (Póster), I. Martín Fabiani, E. Rebollar, S. Pérez, D.R. Rueda, M.C. García-Gutiérrez, A. Szymczyk, Z. Roslaniec, M. Castillejo and T.A. Ezquerra.
<http://www.srps5.org/www.srps5.org/Program.html>

7th International ECNP Conference on Nanostructured Polymers and Nanocomposites, Prague (Czech Republic), 24th-27th of April 2012.

- *On the confined dynamics of a model diblock copolymer studied by dielectric and x-ray scattering techniques* (Invited talk), A. Sanz Parras.

Broadband Dielectric Spectroscopy (BDS) and its Applications; 7th Conference of the International Dielectric Society and 13th Conference on Dielectric & Related Phenomena, Leipzig (Germany), 2nd-7th of September 2012.

- *On the dielectric relaxation of Natural Rubber and the effect of vulcanizing agents* (Invited lecture), M. Hernández, T.A. Ezquerra, R. Verdejo and M.A. López-Manchado.
- *Dynamics on nanotubes of ferroelectric polymer: Confinement and stress effects* (Invited lecture), A. Nogales, J. Martín, A. Sanz and T.A. Ezquerra.
- *Dynamics and cold crystallization of poly (pentamethylene terephthalate) as revealed by dielectric spectroscopy* (Póster), M. Soccio, A. Nogales, T.A. Ezquerra, N. Lotti and A. Munari.
- *Towards homogeneous dynamics in incompatible blends by selective transesterification* (Póster), D.E. Martínez-Tong, M. Soccio, A. Sanz, T.A. Ezquerra, N. Lotti, A. Munari and A. Nogales.
<http://bds2012.uni-leipzig.de/Bilder/Booklet.pdf>

The 13th edition of Trends in Nanotechnology International Conference (TNT2012), Madrid (Spain), 10th-14th of September 2012.

- *Tuning physical properties of polymers by nanoconfinement* (Oral contribution), M.C. García-Gutiérrez, A. Linares, J. Hernández, I. Martín-Fabiani, D. Rueda and T.A. Ezquerra.
<http://www.tntconf.org/2012/programme.php?conf=12>

SLAP2012: XIII Simposio Latinoamericano de Polímeros, XI Congreso Iberoamericano de Polímeros, Bogotá (Colombia), 23rd-26th of September 2012.

- *Aplicación de la técnicas de micro- y nano-indentación al análisis del reciclado mecánico de materiales compuestos con fibras de celulosa* (Oral contribution), F. Montero, C. Fonseca, F. Ania, A. Ochoa and C. González.

FNMA'12–The 9th Conference on Functional and Nanonstructured Materials, Aegina Island (Greece), 23rd-27th of September 2012.

- *Nanostructure characterization of multilayered polymers using synchrotron radiation techniques: Crystallization phenomena* (Invited lecture), F.J. Baltá Calleja, F. Ania and A. Flores.

15th International Small_Angle Scattering Conference SAS2012, Sydney (Australia), 16th-24th of November 2012.

- *Grazing Incidence Small Angle X-ray Scattering of Soft and Hard Nanofabricated Gratings* (Invited Lecture) T.A. Ezquerro, D.R. Rueda, I. Martín-Fabiani, M. Soccio, N. Alayo, F. Pérez-Murano, M.C. García-Gutiérrez, E. Rebollar and M. Castillejo.

4.3. ESTANCIAS DE INVESTIGADORES EN EL INSTITUTO / VISITORS

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

- ❖ **Prof. George Bertsch**, Institute of Nuclear Theory, University of Washington, USA, 29th of January-4th of February 2012.
- ❖ **Prof. M. Hochlaf**, University Paris-Est, Marne la Vallée, France, 16th-21st of February 2012.
- ❖ **Prof. Rodolfo Jalabert**, Institut de Physique et Chimie des Materiaux de Strasbourg, France, 26th of February-4th of March 2012.
- ❖ **Prof. Anton Antonov**, Bulgarian Academy of Sciences, Sofia, Bulgaria, 14th -28th of March 2012.
- ❖ **Dr. Mitko Gaidarov**, Bulgarian Academy of Sciences, Sofia, Bulgaria, 19th of March-2nd of April 2012.
- ❖ **Dr. Dimiter Kadrev**, Bulgarian Academy of Sciences, Sofia, Bulgaria, 19th of March-2nd of April 2012.
- ❖ **Prof. Gustavo Scuseria**, Rice University, Houston, USA, 27th-29th of May 2012.
- ❖ **Prof. Jorge Hirsch**, Instituto de Ciencias Nucleares, Universidad Nacional Autónoma de México, México, 25th-30th of June 2012.
- ❖ **Dr. Jerónimo Cortez Quezada**, Facultad de Ciencias, Universidad Autónoma de México, México D.F., México, 5th-14th of July 2012.
- ❖ **Dr. Hanno Sahlmann**, University of Erlangen-Nurnberg, Erlangen, Germany, 8th-11th of July 2012.
- ❖ **Yen-Wei Liu and Hu-Chien Huang**, LeCosPA, National Taiwan University, Taiwan, 11th-24th of July 2012.
- ❖ **Dr. M. Villa**, Universidad Autónoma Metropolitana de México, México, 4th-16st of September 2012.
- ❖ **Prof. Yoshitaka Fujita**, Osaka University, 6th -7th of September 2012.
- ❖ **Dr. Tomasz Pawlowski**, Warsaw University, Poland, 16th-21st of September 2012.
- ❖ **Manuel Krämer**, University of Cologne, Germany, 17th-21st of September 2012.
- ❖ **Prof. Yoshitaka Fujita**, Osaka University, 25th -26th of September 2012.
- ❖ **Dr. Edward Wilson-Ewing**, Centre de Physique Théorique, Aix-Marseille Université, Marseille, France, 30th of September-6th of October 2012.
- ❖ **Prof. Marek Płoszajczak**, Grand Accélérateur National d'Ions Lourds (GANIL), France, 18th-23th of November 2012.
- ❖ **Prof. Pavel Cejnar**, Charles University, Prague, Czech Republic, 19th-23th of November 2012.
- ❖ **Dr. I. Kleiner**, Université Paris-Est, Créteil, France, 10th-14th of December 2012.

4.3.2 DPTO. DE ESPECTROSCOPIA NUCLEAR, VIBRACIONAL Y MATERIA DESORDENADA / NUCLEAR, VIBRATIONAL AND DESORDERED MEDIA SPECTROSCOPY

- ❖ **Prof. Alessandro Feis**, University of Florence, Italy, 1st January-30st of November 2012.
- ❖ **Dr. Belén Hernández**, Université Paris XIII, Paris, France, 26th -27th June, 15th of October, 19th - 20th of December 2012.
- ❖ **Prof. Kenji Hara**, Catalysis Research Center, Hokkaido University, Sapporo, Japan, 10th-14th of July 2012.
- ❖ **Prof. Ornella Francioso**, Agrarian Faculty, Bologna University, Italy, 16th -21st of July 2012.
- ❖ **Jana Kubackova**, University P. J. Safárik of Kosice, Slovak Republic, 1st September- 31st December 2012.
- ❖ **Jana Preserova**, Palacký University, Olomouc, Czech Republic, 1st September- 30th October 2012.
- ❖ **Dr. Daniel Jancura**, University P. J. Safárik of Kosice, Slovak Republic, 16th-23th of September 2012.

- ❖ **Prof. Pavol Miskovsky**, University P. J. Safarik of Kosice, Slovak Republic, 16th-23th of September 2012.

4.3.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS

- ❖ **Prof. Miguel Carvajal Zaera**, Universidad de Huelva, 29th-31st of January 2012.
- ❖ **Francisco C. Parra-Rojas**, Instituto de Astrofísica de Andalucía (CSIC), 1st March-1st of May 2012.
- ❖ **Prof. Robert E. Grisenti**, J. W. Goethe Universität Frankfurt-am-Main, Germany, 27th-30th of June and 28th-31st of October 2012.
- ❖ **Matthias Kühnel**, J. W. Goethe Universität Frankfurt-am-Main, Germany, 27th-30th of June, and 9th October- 8th of November 2012.
- ❖ **Prof. Alexey K. Rebrov**, Kutateladze Institute of Thermophysics, Russian Academy of Sciences, Novosibirsk, Russia, 15th-17th of July 2012.
- ❖ **Marcos Rojas Cárdenas**, Polytech Marseille, France, 24th-29th of July 2012.
- ❖ **Prof. Alain Barbé**, Université de Reims, France, 16th-19th of October 2012.
- ❖ **Dr. Vicente Timón**, Inst. Andaluz de Ciencias de la Tierra, U. de Granada-CSIC, 23rd of October 2012.
- ❖ **Prof. Dr. Daan Schram**, Technische Universiteit Eindhoven, The Netherlands, 7th of November 2012.
- ❖ **Dr. Laurent H. Coudert**, Université Paris Est Creteil et Paris Diderot, France, 26th-30th of November 2012.
- ❖ **Dr. José Andrés Fernández**, Universidad del País Vasco, Bilbao, 19th-21st of December 2012.
- ❖ **Imanol Usabiaga**, Universidad del País Vasco, Bilbao, 19th-21st of December 2012.

4.3.4 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

- ❖ **Habiba Tabet**, University Ferhat ABBAS, Sétif, (Algeria) 16th-30th of January 2012
- ❖ **Prof. Geoffrey Mitchell**, Centre for Rapid and Sustainable Product Development, Institute Polytechnic Leiria, University of Reading, UK, 7th of March 2012.
- ❖ **Sandra Paszkienicz**, Technical University of Szczecin, Poland, 16th of April-15th of June 2012.
- ❖ **Profesor Djafer Benachour**, Université Ferhat ABBAS, Setif, Algeria, 8th-15th of June 2012
- ❖ **Samira Chaibi**, Université Ferhat ABBAS, Setif, Algeria, 8th-22th of June 2012.
- ❖ **Dr. Foued Zouai**, University of Setif, Setif (Algeria), 20th-29th March 2012, 1-11th of July 2012, 15th-29th September 2012.
- ❖ **Dr. Ángel Romo Uribe**, Instituto de Ciencias Físicas, Universidad Nacional Autónoma de México (UNAM), Cuernavaca (México), 17th-28th of September 2012.
- ❖ **Dr. Said Bouhelal**, Ferhat Abbas University, Sétif, Algeria, 20th-29th March 2012, 15th-29th of September 2012.
- ❖ **Haydee Vargas y Martín Cortés**, Instituto de Ciencias Físicas, Universidad Nacional Autónoma de México (UNAM), Cuernavaca (México), 8th of September-10th of December 2012.
- ❖ **Heriberto Villanueva y Edgar Castillo**, Instituto de Ciencias Físicas, Universidad Nacional Autónoma de México (UNAM), Cuernavaca (México), 15th of September-10th of December 2012.
- ❖ **Dr. Sven Henning**, Fraunhofer Institut, Halle, Germany, 27th of October-4th of November 2012.
- ❖ **M^a Teresa Pastor García**, Universidad. Rey Juan Carlos, Spain, 20th-27th of November 2012
- ❖ **Jing Cui**, Universidad de Industria Liger de Zhengzhou, China, 14th of November 2012-13th of November 2012
- ❖ **Abdelhak Hellati**, El bachir el Ibrahimy B.B.A University, Algeria, 8th-22th of December 2012
- ❖ **Samia Boufassa**, University of Setif, Setif (Algeria), 8th-22th of December 2012

4.4. CONFERENCIAS DE INVESTIGADORES INVITADOS / INVITED CONFERENCES

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

Prof. Etera Livine.

Laboratoire de Physique, ENS Lyon, Lyon, France.

Spin Networks and Classical Dynamics for Loop Quantum Gravity.

4th January 2012.

Dr. Gonzalo Olmo Alba.

Dpt. Física Teórica, Univ. Valencia.

Nonsingular Charged Black Holes in Extensions of General Relativity à la Palatini.

11th May 2012.

Manuel Kramer.

Univ. Cologne, Cologne, Germany.

Can Effects to Quantum Gravity Be Observed in the Cosmic Microwave Background?

11th June 2012.

Prof. Y. Fujita.

Department of Physics, Osaka University, Japan.

Spin-isospin excitations probed by strong, weak and electromagnetic interactions.

7th September 2012.

Prof. Tomasz Pawłowski.

Warsaw University, Warsaw, Poland.

Computable Framework of Loop Quantum Gravity.

19th September 2012.

Dr. Edward Wilson-Ewing.

Aix-Marseille Université, Marseille, France.

Lattice Loop Quantum Cosmology.

2nd October 2012.

International Loop Quantum Gravity Seminars:

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

Dr. Parampreet Singh.

Louisiana State University, Baton Rouge, USA.

Physics of Bianchi Models in LQC.

31st January 2012.

Dr. Claudio Perini.

Penn State University, State College, USA.

Classical Limit of SF on Arbitrary Triangulation.

14th February 2012.

Marc Geller.

Université Paris Diderot, Paris, France.

Continuous Formulation of the LQG Phase Space.

28th February 2012.

Dr. Jacobo Díaz Polo.

Louisiana State University, Baton Rouge, USA.

Black Hole Evaporation in LQG.

13st March 2012.

Tim Koslowski.

Perimeter Institute for Theoretical Physics, Waterloo, Canada.

Effective Field Theories for Quantum Gravity form Shape Dynamics.

10th April 2012.

Sebastian Steinhaus.

Albert Einstein Institut, Potsdam, Germany.

Path Integral Measure and Triangulation Independence in Discrete Gravity.

24th April 2012.

Richard Woodard.

Institute of Fundamental Theory, University of Florida, Gainesville, USA.

Graviton Corrections to Maxwell's Equations.

8th May 2012.

Dr. Lorenzo Sindoni.

Albert Einstein Institut, Potsdam, Germany.

Flux Coherent States.

18th September 2012.

Dr. Derek Wise.

Friedrich-Alexander University, Erlangen-Nürnberg, Germany.

Lifting General Relativity to Observer Space.

2nd October 2012.

Dr. Eugenio Bianchi.

Perimeter Institute for Theoretical Physics, Waterloo, Canada.

Horizon Entropy from Loop Gravity.

16th October 2012.

Sylvain Carrozza.

Albert Einstein Institut, Potsdam, Germany.

Renormalization of Tensorial Group Field Theories.

30th October 2012.

Dr. Simone Speciale.

Centre de Physique Théorique, CNRS, Marseille, France.

Twistorial Structure of Loop Quantum Gravity Transition Amplitudes.

13th November 2012.

Dr. Bianca Dittrich.

Perimeter Institute for Theoretical Physics, Waterloo, Canada.

Coarse Graining: Towards a Cylindrically Consistent Dynamics.

27th November 2012.

4.4.2 DPTO. DE ESPECTROSCOPIA NUCLEAR, VIBRACIONAL Y MATERIA DESORDENADA / NUCLEAR, VIBRATIONAL AND DESORDERED MEDIA SPECTROSCOPY

Prof. Kenji Hara.

Catalysis Research Center, Hokkaido University, Sapporo (Japan).

Preparation and catalytic application of densely-packed metal complex monolayer on metal surfaces.

12th July 2012.

4.4.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS

Prof. Alain Barbé.

Université de Reims, France

The ozone molecule: Infrared spectra, experiment, analyses and atmospheric applications..

17th October 2012.

Dr. Vicente Timón.

Instituto Andaluz de Ciencias de la Tierra, U. de Granada-CSIC.

Aplicaciones de la mineralogía computacional y experimentación a la caracterización espectroscópica y estructural de filosilicatos (arcillas) y óxidos metálicos.

23rd October 2012.

Dr. José Andrés Fernández.

Universidad del País Vasco.

Espectroscopía con resolución de masas de agregados moleculares, con y sin cromóforo.

20th December 2012.

4.4.4 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

Prof. Geoffrey Mitchell.

Centre for Rapid and Sustainable Product Development, Institute Polytechnic Leiria, University of Reading, UK.

Nanostructured Polymers.

7th of March 2012

Dr. Ángel Romo Uribe,

Instituto de Ciencias Físicas, Universidad Nacional Autónoma de México (UNAM), Cuernavaca, México.

Polímeros nanoestructurados funcionales. Interfaz entre Ingeniería y Medicina.

17th of September 2012.

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 Berkovich.

- Rice University, Houston, USA, March 2012 (1 week).
- Universidad Nacional Autónoma de México, Mexico City, México, May 2012 (1 week).
- Royal Institute of Technology, Stockholm, Sweden, June 2012 (1 week).
- Royal Institute of Technology, Stockholm, Sweden, October 2012 (1 week).

José González Carmona.

- Kavli Institute for Theoretical Physics, Santa Barbara, USA, 5th-29th of March 2012.

Jesús Fernando Barbero González.

- Perimeter Institute for Theoretical Physics, Waterloo, Canada, 10th-16th of September 2012.

Eduardo Garrido Bellido.

- Department of Physics and Astronomy, Aarhus University, Aarhus, Denmark, 28th of May-1st of June 2012, and 11th-16th of November 2012.
- Istituto Nazionale di Fisica Nucleare, INFN, Pisa, Italy, 10th-15th of June 2012.

Guillermo A. Mena Marugán.

- Universidade Federal da Bahia, Salvador de Bahia, and Universidade Estadual de Londrina, Londrina, Brazil, 13th-24th of May 2012.
- Universidad de la República, Montevideo, Uruguay, 4th-12th of December 2012.

María Luisa Senent Díez.

- University Paris-Est, Marne la Vallée, France, 11th-17th of April 2012.

- Universidad Túnez El Manar, 20th-26th of May 2012.
- Universidad Autónoma Metropolitana de México, México, 20th-27th of June 2012.

Rafael Alejandro Molina Fernández.

- Centro de Ciencias de Benasque Pedro Pascual, Benasque, Spain, 27th of August-2nd of September 2012.
- Universität Regensburg, Regensburg, Germany, 7th-20th of October 2012.

Gianluca Calcagni.

- Nordita, Stockholm, Sweden, 17th-24th of November 2012.

Mariam Bouhmadi López.

- LeCosPa, National Taiwan University, Taipei, Taiwan, 22nd of October-3rd of December 2012.

Luis J. Garay.

- University of Waterloo and Perimeter Institute, Waterloo, Ontario, Canada, 29th of November-21st of December 2012.

Mikel Fernández Méndez.

- Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg, Erlangen, Germany, 7th of October-7th of December 2012.

Daniel Huerga Gómez.

- Rice University, Houston, USA, 11th-24th of March 2012.
- Université de Sherbrooke, Sherbrooke, Canada, 28th of May-8th of June 2012.
- Université Paul-Sabatier, Toulouse, France, 28th of August-26th of December 2012.

Daniel Martín de Blas.

- Perimeter Institute for Theoretical Physics, Waterloo, Canada, 27th of September-4th of December 2012.

Javier Olmedo Nieto.

- Physics Department, Beira Interior University, Covilhã, Portugal, 1st of February-4th of April 2012.

Óscar Moreno Díaz.

- Center for Theoretical Physics and Laboratory for Nuclear Science, Massachusetts Institute of Technology, Cambridge (Massachusetts), USA, 26th of July-21st of December 2012.

4.5.2 DPTO. DE ESPECTROSCOPIA NUCLEAR, VIBRACIONAL Y MATERIA DESORDENADA / NUCLEAR, VIBRATIONAL AND DESORDERED MEDIA SPECTROSCOPY

Santiago Sánchez Cortés.

- Università di Bologna, Italy, 5th -12th of June 2012.
- Catalysis Research Center, Hokkaido University, Sapporo, Japan, 25th November- 2nd December 2012.

Olof Tengblad.

- TRIUMF, Vancouver, Canada, 1st - 30th of June 2012.
- GSI, Darmstadt, Germany, 5th - 13th of November 2012.

Carlos Cabrillo García.

- Diamond Light Source, United Kingdom, 16th - 23th of February 2012.
- ISIS (Pulsed Neutron and Muon Source), United Kingdom, 13th - 21st of March 2012.
- Institute Laue Langevin, France, 15th - 30th of October 2012.

Ricardo Fernández Perea.

- Diamond Light Source, United Kingdom, 16th - 23rd of February 2012.
- ISIS (Pulsed Neutron and Muon Source), United Kingdom, 13th - 21th of March 2012.

Enrique Náchez González.

- TRIUMF, Vancouver, Canada, 1st - 15th of July 2012.
- ISOLDE, CERN, Geneva, Switzerland, 28th of November - 10th of December 2012.

Mario Cubero Campos.

- TRIUMF, Vancouver, Canada, 20th of June - 7th of July 2012.

Andrés Illana.

- ISOLDE, CERN, Geneva, Switzerland, 3rd – 7th of May 2012.
- ISOLDE, CERN, Geneva, Switzerland, 16th – 23rd of October 2012.

José Sánchez Del Río.

- GSI, Darmstadt, Germany, 5th - 13th of November 2012.

José Antonio Briz Monago.

- ISOLDE, CERN, Geneva, Switzerland, 24th - 31st of May 2012.
- ISOLDE, CERN, Geneva, Switzerland, 3rd - 10th of July 2012.
- ISOLDE, CERN, Geneva, Switzerland, 24th of October - 20th of December 2012.

Mariano Carmona Gallardo.

- TRIUMF, Vancouver, Canada, 16th of March - 16th of June 2012.
- ISOLDE, CERN, Geneva, Switzerland, 3rd - 10th of July 2012.
- ISOLDE, CERN, Geneva, Switzerland, 10th - 17th of December 2012.

Guillermo Ribeiro Jiménez.

- GSI, Darmstadt, Germany, 12th of April - 10th of July 2012.
- ISOLDE, CERN, Geneva, Switzerland, 11th - 22nd of July 2012.
- ISOLDE, CERN, Geneva, Switzerland, 1st - 10th of August 2012.
- GSI, Darmstadt, Germany, 5th - 13th of November 2012.

Ángel Perea.

- TRIUMF, Vancouver, Canada, 1st of June - 15th of July 2012.
- GSI, Darmstadt, Germany, 5th - 13th of November 2012.

4.5.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS

Juan Ortigoso.

- Laboratoire InterUniversitaire des Systemes Atmospheriques, CNRS, Paris, France. 1st-10th of October 2012.

Óscar Gálvez.

- Technical University of Vienna, 23th of April-5th of May 2012.
- Institute of Material Chemistry. Vienna University of Technology, Vienna, Austria, November 25th of November-1st of December 2012.

4.5.4 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

Javier Martínez de Salazar Bascuñana.

- Universidad Simón Bolívar, Caracas, Venezuela, 20th-27th of April 2012.

Esperanza Cagiao Escotado.

- Universidad Ferhat ABBAS, Sétif, Algeria, 22nd-29th of June 2012.

Juan Felipe Franco González.

- Biomolecular Science and Biotechnology Institute, University of Groningen, Groningen, The Netherlands, 1st May- 1th July 2012.

Ignacio Martín-Fabiani Carrato.

- Albert-Ludwigs University, Freiburg, Germany, 3rd of May-1st of August 2012

Daniel Martínez Tong.

- Universidad Libre de Bruselas, 8th of October-20th of December 2012.

Sara Sanmartín Sánchez.

- Groupe Théorie et Simulation des Polymères, Institut Charles Sadron, Strasbourg, France, 1st of March- 1st of May 2012.

CAPÍTULO 5
LABOR DOCENTE, DIFUSIÓN DE LA CIENCIA
Y OTRAS ACTIVIDADES

CHAPTER 5
TEACHING, OUTREACH AND OTHER
ACTIVITIES

5.1 DOCENCIA / TEACHING

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

Pedro Sarriguren Suquilbide.

- Estructura Nuclear - Máster Interuniversitario en Física Nuclear - Curso 2011-2012.
Universidad Autónoma de Madrid.
HORAS de docencia IMPARTIDA: 12.
- Estructura Nuclear - Máster Interuniversitario en Física Nuclear - Curso 2012-2013.
Universidad Autónoma de Madrid.
HORAS de docencia IMPARTIDA: 12.

Luis J. Garay.

- Geometría Diferencial Avanzada - Licenciatura en Ciencias Físicas -
Universidad Complutense de Madrid.
HORAS de docencia IMPARTIDA: 45.
- Geometría Diferencial y Cálculo Tensorial - Grado en Ciencias Físicas -
Universidad Complutense de Madrid.
HORAS de docencia IMPARTIDA: 45.
- Relatividad General Avanzada - Máster en Física Fundamental -
Universidad Complutense de Madrid.
HORAS de docencia IMPARTIDA: 23.

Elvira Moya Valgañón.

- Física Nuclear y de Partículas - Quinto curso de la Licenciatura en Ciencias Físicas, Máster en Física Fundamental y Máster Interuniversitario de Física Nuclear -
Universidad Complutense de Madrid.
HORAS de docencia IMPARTIDA: 40.
- Estructura Nuclear - Licenciatura en Física y Máster de Física Fundamental -
Universidad Complutense de Madrid.
HORAS de docencia IMPARTIDA: 45.

Óscar Moreno Díaz.

- Estructura Nuclear - Licenciatura en Física y Máster de Física Fundamental -
Universidad Complutense de Madrid.
HORAS de docencia IMPARTIDA: 20.
- Física Nuclear y de Partículas - Licenciatura en Física y Máster de Física Fundamental, grupos B y C -
Universidad Complutense de Madrid.
HORAS de docencia IMPARTIDA: 20.
- Física Nuclear y de Partículas, Laboratorio - Licenciatura en Física y Máster de Física Fundamental, grupos B y C -
Universidad Complutense de Madrid.
HORAS de docencia IMPARTIDA: 10.
- Complementos de Física, Laboratorio - Máster en Formación de Profesorado de Educación Secundaria y Bachillerato -
Universidad Complutense de Madrid.
HORAS de docencia IMPARTIDA: 20.

5.1.2 DPTO. DE ESPECTROSCOPIA NUCLEAR, VIBRACIONAL Y MATERIA DESORDENADA / NUCLEAR, VIBRATIONAL AND DESORDERED MEDIA SPECTROSCOPY

Olof Tengblad.

- Técnicas Experimentales en Física Nuclear - Máster Interuniversitario de Física Nuclear - Universidad de Sevilla.
HORAS de docencia IMPARTIDA: 25.
- Experimental Techniques in Plasma, Nuclear Physics and Materials - Máster Erasmus Mundus “Nuclear Fusion Science and Engineering Physics”- Universidad Carlos III de Madrid.
HORAS de docencia IMPARTIDA: 12. (Laboratory Project-CSIC).

Sagrario Martínez Ramírez.

- Química Del Cemento.
Universidad Politécnica de Madrid.
HORAS de docencia IMPARTIDA: 4 (curso de 50 créditos).
- Caracterización de Morteros Históricos - Curso Posgrado CSIC - Universidad Complutense de Madrid.
HORAS de docencia IMPARTIDA: 1 (curso de 20 horas).

Enrique Náchter González.

- Técnicas Experimentales en Física Nuclear - Máster Interuniversitario de Física Nuclear - Universidad de Sevilla.
HORAS de docencia IMPARTIDA: 12.
- Física Nuclear Experimental - Máster Erasmus Mundus “Nuclear Fusion Science and Engineering Physics”- Universidad Carlos III de Madrid.
HORAS de docencia IMPARTIDA: 12.

Paz Sevilla Sierra.

- Caracterización y propiedades de fármacos y sistemas afines Módulo: I+D+i en fármacos - Máster en Ciencias Farmacéuticas - Universidad Complutense de Madrid.
HORAS de docencia IMPARTIDA: 25.
- Físico-Química Farmacéutica - Grado en Farmacia - Universidad Complutense de Madrid.
HORAS de docencia IMPARTIDA: 30.

Mario Cubero Campos.

- Técnicas Experimentales en Física Nuclear - Máster Interuniversitario de Física Nuclear - Universidad de Sevilla.
HORAS de docencia IMPARTIDA: 12.
- Curso de Instrumentación Nuclear - Maestría en Física Médica - Universidad Nacional de Costa Rica.
HORAS de docencia IMPARTIDA: 15.

Andrés Illana Sisón.

- Técnicas Experimentales en Física Nuclear - Máster Interuniversitario de Física Nuclear - Universidad de Sevilla.
HORAS de docencia IMPARTIDA: 12.

Vicente Pesudo.

- Técnicas Experimentales en Física Nuclear - Máster Interuniversitario de Física Nuclear -

Universidad de Sevilla.
HORAS de docencia IMPARTIDA: 12.

- Curso de Instrumentación Nuclear - Maestría en Física Médica-
Universidad Nacional de Costa Rica.
HORAS de docencia IMPARTIDA: 8.
- Física Nuclear Experimental - Máster Erasmus Mundus “Nuclear Fusion Science and Engineering
Physics”-
Universidad Carlos III de Madrid.
HORAS de docencia IMPARTIDA: 10.

José Sánchez del Río Sáez.

- Técnicas Experimentales en Física Nuclear - Máster Interuniversitario de Física Nuclear -
Universidad de Sevilla.
HORAS de docencia IMPARTIDA: 12.
- Curso de Instrumentación Nuclear - Maestría en Física Médica -
Universidad Nacional de Costa Rica.
HORAS de docencia IMPARTIDA: 8.

José Antonio Briz Monago.

- Técnicas Experimentales en Física Nuclear - Máster Interuniversitario de Física Nuclear -
Universidad de Sevilla.
HORAS de docencia IMPARTIDA: 12.
- Física Nuclear Experimental - Máster Erasmus Mundus “Nuclear Fusion Science and Engineering
Physics”-
Universidad Carlos III de Madrid.
HORAS de docencia IMPARTIDA: 10.
- Curso de Instrumentación Nuclear - Maestría en Física Médica -
Universidad Nacional de Costa Rica.
HORAS de docencia IMPARTIDA: 8.

Mariano Carmona Gallardo.

- Técnicas Experimentales en Física Nuclear - Máster Interuniversitario de Física Nuclear -
Universidad de Sevilla.
HORAS de docencia IMPARTIDA: 12.
- Curso de Instrumentación Nuclear - Maestría en Física Médica-
Universidad Nacional de Costa Rica.
HORAS de docencia IMPARTIDA: 8.

Guillermo Ribeiro Jiménez.

- Técnicas Experimentales en Física Nuclear - Máster Interuniversitario de Física Nuclear -
Universidad de Sevilla.
HORAS de docencia IMPARTIDA: 12.

5.1.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS

José Luis Doménech Martínez.

- Técnicas Espectroscópicas e Instrumentación - Máster interuniversitario “Láseres y sus aplicaciones en
Química (QUIMILÁSER)” -
Coordina Universidad Pablo de Olavide, participan UVA, UPV/EHU, UCLM, UBU, UIR, UMA, UJA.
HORAS de docencia IMPARTIDA: 4.

José Ma. Fernández Sánchez.

- Técnicas Espectroscópicas e Instrumentación - Máster Interuniversitario “Láseres y sus aplicaciones en
Química”
Coordina Universidad Pablo de Olavide, participan UVA, UPV/EHU, UCLM, UBU, UIR, UMA, UJA.

HORAS de docencia IMPARTIDA: 2.

5.1.4 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

Javier Martínez-Salazar.

- Procesos inducidos por nanotubos en matrices poliolefinicas en la II Escuela de Macromoléculas 2012 EMAC.
HORAS de docencia IMPARTIDA: 2.
- Aplicación de técnicas computacionales al estudio de procesos viscoelásticos y de cristalización en polímeros en la II Escuela de Macromoléculas 2012 EMAC.
HORAS de docencia IMPARTIDA: 2.

5.2 CURSOS Y CONFERENCIAS / COURSES AND CONFERENCES

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

Jorge Dukelsky Bercovich.

- *Integrable Richardson-Gaudin models in mesoscopic physics*, Rice University, Houston, USA, 14th of March 2012.
- *Integrable Richardson-Gaudin models in mesoscopic physics*, Universidad Autónoma de Madrid, Spain, 18th of April 2012.
- *Exactly solvable Richardson-Gaudin model*, Royal Institute of Technology, Stockholm, Sweden, 23th of July 2012.

J. Fernando Barbero G.

- *Combinatorics and the thermodynamic limit for black holes in Loop*. Perimeter Institute, Waterloo, Canada, 13th of September 2012.
- *Loop quantum gravity: Introduction and present status*, Universidad de Valencia, Spain, 25th of October 2012.

Guillermo A. Mena Marugán.

- *Loop Quantum Cosmology*, Universidade Federal da Bahia, Salvador de Bahia, Brazil, 15th of May 2012.
- *Loop Quantum Cosmology*, Universidade Estadual de Londrina, Londrina, Brazil, 18th of May 2012.
- *Cosmología Cuántica de Lazos*, Instituto de Física, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay, 5th of December 2012.

Rafael Alejandro Molina Fernández.

- *Scattering phase of quantum dots: Emergence of universal behavior*, Instituto de Ciencia de Materiales, Madrid, Spain, 20th of September 2012.
- *Emergence of universal behavior in the scattering phase of quantum dots*, Universität Regensburg, Germany, 16th of October 2012.
- *Scattering phase of quantum dots: Emergence of universal behavior*, Universidad de Zaragoza, Spain, 23th of November 2012.

Gianluca Calcagni.

- *Field Theory on Multifractal Spacetimes*, University of Nottingham, UK, 14th of December 2012.

Mariam Bouhmadi López.

- *Beyond the Big Crunch: The New Faces of Other Possible Cosmic Doomsdays*, LeCosPA, National Taiwan University, Taipei, Taiwan, 30th of October 2012.
- *Smoking Guns of a Bounce in Modified Theories of Gravity through the Spectrum of the Gravitational Waves*, LeCosPA, National Taiwan University, Taipei, Taiwan, 20th of November 2012.

Luis J. Garay.

- *Black Holes... To Be, or Not To Be, That Is the Question*, Univ. Waterloo, Canada, 7th of December 2012.

- *Black holes... To Be, or Not To Be, That Is the Question*, Perimeter Institute, Waterloo, Canada, 12th of December 2012.

Elvira Moya de Guerra.

- *Search for keV sterile neutrinos in nuclear beta decays*, Observatoire de Paris, Paris, France, 5th of February 2012.
- *Nuclear Physics probed with electrons: The Sofia-Madrid Collaboration*, Bulgarian Academy of Sciences, Sofia, Bulgaria, 18th of October 2012.

Mikel Fernández Méndez.

- *Unique Fock Quantization of Scalar Cosmological Perturbations*, Universidade da Beira Interior, Covilhã, Portugal, 10th of February 2012.
- *Quantum Cosmological Perturbations in a Loop Quantum Cosmology Background*, Institute for Theoretical Physics, Univ. Cologne, Cologne, Germany, 13th of November 2012.
- *Complete Quantization of an Inflationary Scenario with Scalar Perturbations*, Institute for Quantum Gravity, Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg, Erlangen, Germany, 21st of November 2012.

Daniel Martín de Blas.

- *Unitary Dynamics in the Quantization of a Massless Scalar Field in de Sitter Spacetime*, Universidade da Beira Interior, Covilhã, Portugal, 10th of February 2012.

Javier Olmedo Nieto.

- *Complete Hybrid Quantization of an Inflationary Universe with Inhomogeneities*, Universidade da Beira Interior, Covilhã, Portugal, 10th of February 2012.

Óscar Moreno Díaz.

- *Electroweak Processes in Nuclei*, Seminar Series of the Laboratory for Nuclear Science, Massachusetts Institute of Technology, Cambridge (Massachusetts), USA, 4th of December 2012.
- *Introducción a la Física Nuclear y de Partículas*, I.E.S. Calderón de la Barca, Madrid, 28th of May 2012.
- *Física Nuclear, Física 2º Bachillerato*, I.E.S. Calderón de la Barca, Madrid, 1st-16th of May 2012.

5.2.2 DPTO. DE ESPECTROSCOPIA NUCLEAR, VIBRACIONAL Y MATERIA DESORDENADA / NUCLEAR, VIBRATIONAL AND DESORDERED MEDIA SPECTROSCOPY

Santiago Sánchez Cortés.

- *Molecular Detection of Drugs and Pollutants on Plasmonic Nanoparticles by SERS. Advanced Processes in Optical Sensing and Photonic Applications* (International Spring School of the MICROSERES de la Comunidad de Madrid Consortia), Miraflores (Spain), 28th May- 1st June 2012.

José A. Sánchez-Gil.

- *Shaping nanoparticles for plasmon-enhanced applications: Shape matters. Advanced Processes in Optical Sensing and Photonic Applications* (International Spring School of the MICROSERES de la Comunidad de Madrid Consortia), Miraflores (Spain), 28th May- 1st June 2012.

Paz Sevilla Sierra.

- *Design of novel drug delivery systems based on surfaced enhanced fluorescence. Advanced Processes in Optical Sensing and Photonic Applications* (International Spring School of the MICROSERES de la Comunidad de Madrid Consortia), Miraflores (Spain), 28th May- 1st June 2012.

5.2.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS

Concepción Domingo Maroto.

- *Técnicas de espectroscopía Raman y aplicaciones en el Patrimonio Cultural*, Instituto Universitario de Investigación en Ciencias Policiales, Universidad de Alcalá de Henares, Madrid, 5th of June 2012.

José M^a Fernández Sánchez.

- *Filamentos de Hidrógeno Líquido Subenfriado. Experimentos Mediante Espectroscopía Raman*, Universidad de Huelva, 30th of May 2012.

Isabel Tanarro Onrubia.

- *Plasma, el cuarto estado de la materia.* TECNATOM, San Sebastián de los Reyes, 19th of April 2012.

Belén Maté.

- *Infrared spectroscopy of ions and aminoacids in interstellar ice analogues.* **Conferencia invitada.** University of Leiden, Leiden Observatory. Sackler Laboratory for Astrophysics, The Netherlands, 30th of May 2012.

5.2.4 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

Javier Martínez de Salazar Bascuñana.

- *Procesos inducidos por nanotubos en matrices poliolefinicas* en la II Escuela de Macromoléculas 2012 EMAC, Caracas, Venezuela, 23rd of April 2012.
- *Aplicación de técnicas computacionales al estudio de procesos viscoelásticos y de cristalización en polímeros* en la II Escuela de Macromoléculas 2012 EMAC, Caracas, Venezuela, 25th of April 2012.

Juan Francisco Vega Borrego.

- *Experimentos, teorías y simulación por ordenador aplicados a la reología: efecto de las ramificaciones en poliolefinas* en el Máster en Alta Especialización en Plásticos y Cauchos, Universidad Internacional Menéndez Pelayo-CSIC, 2nd of March 2012.

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

Jorge Dukelsky Bercovich.

- *Workshop on quantum phase transitions and dynamics in two-level systems*, Instituto de Estructura de la materia, Madrid, 27th-28th of June 2012.

Fernando Barbero González.

- *Relatividad General Cuántica*, part of the “IX Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia”, Instituto de Estructura de la Materia, Madrid, 30th of March 2012.

María Luisa Senent Díez.

- *Aplicación de los métodos Ab initio al estudio de sistemas moleculares de interés astrofísico*, part of the “IX Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia”, Instituto de Estructura de la Materia, Madrid, 30th of March 2012.

Rafael Alejandro Molina Fernández.

- *Física mesocópica*, part of the “IX Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia”, Instituto de Estructura de la Materia, Madrid, 30th of March 2012.

Gianluca Calcagni.

- *Introduction to Multifractional Spacetimes*, Instituto de Estructura de la Materia, Madrid, 25th of September 2012.

Pablo San José Martín.

- *Materiales sorprendentes*, Instituto de Estructura de la Materia, Madrid, 27th of June 2012.

5.3.2 DPTO. DE ESPECTROSCOPIA NUCLEAR, VIBRACIONAL Y MATERIA DESORDENADA / NUCLEAR, VIBRATIONAL AND DESORDERED MEDIA SPECTROSCOPY

Olof Tengblad.

- *R3B Status (NUSTAR & FAIR) future analysis and perspectives*, part of the R3B Meeting, Madrid, Instituto de Estructura de la Materia, Madrid, 11th of December 2012.
<http://161.111.23.177/r3bmeeting/>

Carlos Cabrillo García.

- *La física de la materia desordenada*, part of the “IX Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia”, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 27th of March 2012.

Pedro Carmona Hernández.

- *Aplicaciones biológicas de la espectroscopía vibracional*, part of the “IX Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia”, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 27th of March 2012.

Ana Delia Becerril Reyes

- *Reacciones y estructura nuclear: Investigación paso a paso*, part of the “IX Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia”, Instituto de Estructura de la Materia, Madrid, 27th of March 2012.

Marina Molina Santos.

- *Aplicaciones biológicas de la espectroscopía infrarroja y raman*, part of the “IX Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia”, Instituto de Estructura de la Materia, Madrid, 27th of March 2012.

Riccardo Orlandi.

- *Fenómenos sorprendentes en núcleos exóticos*, part of the “IX Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia”, Instituto de Estructura de la Materia, Madrid, 27th of March 2012.

Irene Izquierdo Lorenzo.

- *Plasmónica: detección molecular intensificada sobre nanoestructuras metálicas*, part of the “IX Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia”, Instituto de Estructura de la Materia, Madrid, 27th of March 2012.

Fernando López-Tejeira Sagüés.

- *Nanofotónica y Metamateriales en el IEM*, part of the “IX Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia”, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 27th of March 2012.

5.3.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS

Rafael Escribano Torres.

- *Advanced Spectroscopy in Chemistry Master Course, Erasmus Mundus Programme of the EU, member of the Organizing Committee*, with participation of seven European Universities, from 2005 on.

José M^a Fernández Sánchez.

- *Filamentos de Hidrógeno Líquido Subenfriado. Experimentos Mediante Espectroscopía Raman*, Ciclo de Seminarios del IEM, Instituto de Estructura de la Materia, Madrid, 9th of March 2012.

Raúl Zósimo Martínez Torres.

- *Espectroscopía láser de alta resolución en moléculas ligeras*, part of the “IX Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia”, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 28th of March 2012.

Belén Maté Naya.

- *Hielos y plasmas de interés atmosférico y astrofísico*, part of the “IX Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia”, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 28th of March 2012.

Juan Ortigoso Martínez.

- *Control cuántico de las moléculas dipolares ultrafrías*, part of the “IX Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia”, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 28th of March 2012.

Guzman Tejeda Gala.

- *Espectroscopia Raman en Chorros Supersónicos*, part of the “IX Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia”, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 28th of March 2012.

Julio Santos Gómez.

- *Control Cuántico de Moléculas Dipolares Ultrafrías*, part of the “IX Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia”, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 28th of March 2012.

Óscar Gálvez González.

- *IX Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia: de las partículas elementales a los sistemas de alto peso molecular* (Organizer), Instituto de Estructura de la Materia CSIC, Madrid, 27th-30th of March 2012.

5.3.4 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

Javier Martínez de Salazar Bascuñana.

- *Aproximación dinámica a sistemas macromoleculares*, part of the “IX Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia”, Instituto de Estructura de la Materia CSIC, Madrid, 28th of March 2012.

Amelia Linares Dos Santos.

- *Polímeros compuestos: una estrategia para el desarrollo de nuevos materiales*, part of the “IX Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia”, Instituto de Estructura de la Materia CSIC, Madrid, 28th of March 2012.

Juan Francisco Vega Borrego y M^a Teresa Expósito Espinosa.

- *Reometría básica aplicada a polímeros sintéticos: viscoelasticidad en poliolefinas y mezclas*. Instituto de Estructura de la Materia, CSIC/Universidad Juan Carlos (Organizers), Madrid, 19th of November 2012.

M^a Teresa Expósito Espinosa. Dpto. Tecnología y Química Ambiental, Universidad Rey Juan Carlos.

- *Poliolefinas multifásicas: polipropilenos heterofásicos*. Ciclo de Seminarios del IEM, Instituto de Estructura de la Materia CSIC, Madrid, April 2012.

Javier Ramos Díaz.

- *IX Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia: de las partículas elementales a los sistemas de alto peso molecular* (Organizer), Instituto de Estructura de la Materia CSIC, Madrid, 27th-30th of March 2012.

Michela Soccio.

- *Fabricación de nanoestructuras poliméricas*, part of the “IX Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia”, Instituto de Estructura de la Materia CSIC, Madrid, 28th of March 2012.

Ernesto Vicente Alique.

- *Estructura de macromoléculas biológicas mediante microscopia electrónica de transmisión y dispersión de luz*, part of the “IX Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia”, Instituto de Estructura de la Materia CSIC, Madrid, 28th of March 2012.

5.4 PREMIOS Y OTROS MÉRITOS / AWARDS

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

José González Carmona.

- Member of the Scientific Advisory Committee of the International Conference *Nanoscience and Nanotechnology 2012*. Frascati (Italy).

Jesús Fernando Barbero González.

- Member of the Scientific Advisory Committee of the International Conference *Loops 2013*. Waterloo (Canada).
- Member of the Scientific Advisory Committee of the *XXI International Fall workshop on Geometry and Physics*. Burgos (Spain).

Guillermo Antonio Mena Marugán.

- Member of the Scientific Advisory Committee of the International Conference *Loops 2013*. Waterloo (Canada).
- Chairman in the parallel session “Gravity, Quantum and Black Holes” of the *International Conference on Mathematical Modeling in Physical Sciences*. Budapest (Hungary), 3rd -7th of September 2012.

María Luisa Senent Diez.

- Member of the Scientific Advisory Committee of the International Conference *AMOC 2012* (Anharmonicity in medium-sized molecules and clusters). Paris (France).
- Member of the Scientific Advisory Committee of the International Conference *ISTC 2012*. Argel (Argelia).

Rafael Alejandro Molina Fernández.

- Member of the Scientific and Local Organizing Committees of the international conference *8th Workshop on Disordered Systems*. Benasque (Spain).
- Member of the jury of the *SINIF 2012* research prize.

Elvira Moya de Guerra.

- Vicepresident of the Accreditation Committee of Science Professors (ANECA), Madrid (Spain).
- Member of the Editorial Board of the *Annals of the Academy of Romanian Scientists (Physics Series)*.
- Member of the FAIR Scientific Council (GSI, Germany).

Óscar Moreno Díaz.

- PhD extraordinary award, Facultad de Ciencias Físicas, Universidad Complutense de Madrid.
- Honorable Mention of the European Physical Society, Nuclear Physics Board, for Ph D in Nuclear Physics 2009-2011.

5.4.2 DPTO. DE ESPECTROSCOPIA NUCLEAR, VIBRACIONAL Y MATERIA DESORDENADA / NUCLEAR, VIBRATIONAL AND DESORDERED MEDIA SPECTROSCOPY

Santiago Sánchez Cortés.

- President of the Spectroscopy Committee of the *Spanish Society of Optics* (until September 2012).
- Member of the *Spanish Society of Optics* Advisory Committee (until September 2012).
- Member of the Editorial Board of the *Vibrational Spectroscopy Journal*.

M^a José García Borge.

- Local organizer and member of the *ISOLDE Workshop* Advisory Committee at CERN, Geneva, Switzerland (December 17-19).
- Member of the International Advisory Committee of the *École Joliot-Curie*, 2012.

José Vicente García Ramos.

- Member of the External Advisory Committee of the “Molecular Chemical Physics” 70/94 R&D Unit of the *University of Coimbra* (Portugal).

Carlos Cabrillo García.

- Member of Facility Evaluation Panel on Disordered Matter (FAP2) of the *ISIS Pulsed Neutron & Muon Source*.
- Member of the local organizer committee of the VI Reunión de la *Sociedad Española de Técnicas Neutrónicas* 2012, Segovia, Spain.

José A. Sánchez Gil.

- Member of the *Scientific Committee* of the Conferencia Española de Nanofotónica (Spain).
- Member of the *Scientific Reviewing Panel* of the 6th International Congress on Advanced Electromagnetic Materials in Microwaves and Optics (METAMATERIALS 2012), St. Petersburg (Russia).

Paz Sevilla Sierra.

- President of the *Scientific Committee* of the XIII Reunion Nacional de Espectroscopia and VII Congreso Iberico de Espectroscopia, Cordoba (Spain), 17th -20th of September 2012.

5.4.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS

Dionisio Bermejo Plaza.

- Member of the International Advisory Committee of the *International conference on Spectral line shapes*.
- Member of the International Steering Committee of the *European Conference on Non-linear Optics* (ECONOS).
- Member of the International Advisory Committee of the *Colloquium on High Resolution Molecular spectroscopy*.
- Adjunct Profesor in the Department of Physics and Astronomy at the *University of Lethbridge*, Lethbridge, Canadá.

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)* (Spain).
- Vicepresident of the board of the Grupo Especializado de Física Atómico y Molecular (GEFAM) of the *Real Sociedad Española de Física* (RSEF) (Spain).

Salvador Montero Martín.

- Member of the Local Organizing Committee of the 28th *International Symposium on Rarefied Gas Dynamics*, Zaragoza (Spain).
- Member of the Scientific Organising Committee of the 2nd *National Conference on Laboratory and Molecular Astrophysics*, Seville (Spain).
- Member of the Editorial Board of the *Journal of Raman Spectroscopy*, Wiley (United Kingdom).

José Luis Doménech Martínez.

- Member of the International Advisory Committee of the *OSU International Symposium on Molecular Spectroscopy*, Columbus (USA).

Isabel Tanarro Onrubia.

- Member of the board of the *Asociación Española de Vacío y sus aplicaciones (ASEVA)* (Spain).
- Member of the board of the “Grupo de Plasmas” of the *Real Sociedad Española de Física* (Spain).
- Member of the Scientific Committee of the 39th *European Physical Society Conference on Plasma Physics and 16th International Congress on Plasma Physics*, Stockholm (Sweden).

Belén Maté Naya.

- Member of the Scientific Committee of the *XXIII Reunión Nacional de Espectroscopia*, Cordoba (Spain).
- President of the “Comité de Espectroscopia” of the *Sociedad Española de Optica* (Spain).

Guzmán Tejada Gala.

- Secretary of the *Sociedad Española de Óptica SEDOPTICA* (until September) (Spain).

5.4.4 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

Aurora Nogales Ruiz.

- Member of the Facility Access Panel 5. Spectroscopy of the Neutron Facility ISIS at the Appleton Rutherford Laboratory since June 2011.
- Member of the DUBBLE Assessment Committee from the Netherlands Organization for Scientific Research (NWO) since April 2011.

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”.

Tiberio A. Ezquerro Sanz.

- Member of the *International Dielectric Society Board* of the *International Dielectric Society* (<http://permittivity.org>).
- Member of the *Scientific Council (SCO)* of the Institut Laue-Langevin, Grenoble, France.

Javier Martínez de Salazar Bascuñana.

- Member of *Trustees 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”.
- *Assistant Editor* of the journal “e-Polymer”.

Araceli Flores Aguilar-Amat.

- Member of the scientific committee of the POLYCHAR World Forum.
- Guest Editor of the POLYCHAR20 special issue in the Journal Macromolecular Symposia.

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, January 2010-July 2012.

Juan Francisco Vega Borrego.

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

**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.

Nanociencia del carbono: fullerenos, nanotubos y grafeno.

Talk in the XII Semana de la Ciencia, Instituto de Estructura de la Materia, Madrid.
15th of November 2012.

J. Fernando Barbero González.

Materiales Asombrosos.
I.E.S. El Álamo.
26th of March 2012.

Menudos elementos! (Todo lo que usted quiso saber sobre la tabla periódica pero nunca se atrevió a preguntar). I.E.S. José Luis Sampedro.
27th of March 2012.

Materiales Asombrosos.
I.E.S. José Luis Sampedro.
27th of March 2012.

Materiales Asombrosos.
I.E.S. Profesor Máximo Trueba.
28th of March 2012.

Materiales Asombrosos.
I.E.S. Marqués de Suanzes.
17th of April 2012.

Materiales Asombrosos.
I.E.S. Velázquez.
18th of April 2012.

Agujeros negros y física contemporánea.
Talk in the XII Semana de la Ciencia, Instituto de Estructura de la Materia, Madrid.
8th of November 2012.

Menudos elementos! (Todo lo que usted quiso saber sobre la tabla periódica pero nunca se atrevió a preguntar). Talk in the XII Semana de la Ciencia, Instituto de Estructura de la Materia, Madrid.
15th of November 2012.

Materiales Asombrosos.
I.E.S. Mariano Quintanilla, Segovia.
20th of December 2012.

Materiales Asombrosos.
I.E.S. Diego Velazquez.
21st of December 2012.

Guillermo Antonio Mena Marugán.

Entrevista en el programa de televisión *La 2 Noticias*.
La 2. RTVE.
<http://www.rtve.es/alicarta/videos/la-2-noticias/2-noticias-30-03-12/1364176/>
30th of March 2012.

Entrevista en el programa de radio *A Hombros de Gigantes*.
Radio 5, RNE.
<http://www.rtve.es/alicarta/audios/a-hombros-de-gigantes/hombros-gigantes-comunidad-cientifica-pide-gobierno-mantenga-financiacion-para-id-31-03-2012-01-04-2012/1364132/>
31st of March 2012.

Del Big Bang al Big Bounce.
E.T.S.I. Minas, Madrid.
3rd of May 2012.

Curvas Temporales Cerradas; Ciencia, Teatro y Caricaturas.
Oral contribution to the “**IV Jornadas de Teatro Científico Divulgativo**”. Medellín (Badajoz).

26th-30th of September 2012.

Luis J. Garay.

Física de agujeros negros, en la jornada La Complu en la calle.
Casa Encendida, Madrid.
28th of November 2012

Elvira Moya Valgañón.

De Materia Inerte a Vida Inorgánica, ciclo “Foro de Ciencia”.
Banco Santander, Madrid.
22nd of March 2012.

El Futuro de la Física Nuclear.
Universidad de Salamanca, Salamanca.
16th of July 2012.

5.5.2 DPTO. DE ESPECTROSCOPIA NUCLEAR, VIBRACIONAL Y MATERIA DESORDENADA / NUCLEAR, VIBRATIONAL AND DESORDERED MEDIA SPECTROSCOPY

Francisco Javier Bermejo.

Zer da eta zertarako balio du Bilboko ESS Partzuergoak eraikiko duen azpiegiturak?
EKAIA, Journal on Science and Technology.
Edited by University of Basque Country, Issue 25, 2012.
ISSN: 0214-9001

José Vicente García Ramos.

El científico ante los medios de comunicación (seminar)
Fundación Esteve, Instituto de RTVE, Madrid (Spain).
7th-8th of November 2012.

Sagrario Martínez Ramírez.

Mis primeros pasos en la Investigación (workshop of Science Week Program).
Colegio La Inmaculada, Madrid (Spain).
8th of November 2012.

Mis primeros pasos en la Investigación (workshop of the Science Week Program).
Colegio María Virgen, Madrid (Spain).
29th of November 2012.

Mis primeros pasos en la Investigación (workshop of the Science Week Program).
C.P. Ramiro de Maeztu, Madrid (Spain).
13th, 15th, 16th of November 2012.

Enrique Nácher González.

Viaje al Interior de la Materia (Outreach Talks CPAN).
I.E.S. Infanta Elena, Galapagar, Madrid.
9th of May 2012.

Vicente Pesudo Fortes.

Viaje al Interior de la Materia (talk of the Science Week Program).
IEM-CSIC, Madrid.
16th of November 2012.

José Sánchez del Río.

Detectores de Radiación y centelleo. Simulaciones Montecarlo (talk of the Science Week Program).
IEM-CSIC, Madrid.
9th of May 2012.

Mariano Carmona Gallardo.

Viaje al Interior de la Materia (Outreach Talks CPAN).
I.E.S Isaac Albéniz, Leganés, Madrid.
19th of December 2012.

5.5.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS

Rafael Escribano.

What can be made in the lab can be found out there... and vice-versa (almost).
Conference imparted at Clare Hall Spain Members Association, Sevilla.
28th of September 2012.

Víctor J. Herrero.

La Química del Cosmos.
XII Semana de la Ciencia de la Comunidad de Madrid.
IEM-CSIC.
8th of November 2012.

Isabel Tanarro Onrubia.

Plasma, el cuarto estado de la materia.
XII Semana de la Ciencia de la Comunidad de Madrid.
IEM-CSIC.
6th of November 2012.

Plasma, el cuarto estado de la materia.
(Conference and guided visit to students of 2º Bachillerato of Colegio Arturo Soria de Madrid).
IEM- CSIC.
24th of February 2012.

José Ma. Fernández Sánchez y Guzmán Tejeda Gala.

El Laboratorio de Fluidodinámica Molecular.
(Conference and guided visit to students of 2º Bachillerato of Colegio Arturo Soria de Madrid).
Instituto de Estructura de la Materia (CSIC) Madrid.
24th of February 2012.

Óscar Gálvez González.

Hielo en el Universo: de la Tierra al Medio Interestelar.
XII Semana de la Ciencia de la Comunidad de Madrid.
IEM-CSIC.
7th of November 2012.

¿Qué es la química cuántica y para qué sirve
XII Semana de la Ciencia de la Comunidad de Madrid.
IEM-CSIC.
16th of November 2012.

Yamilet Rodríguez Lazcano.

Visita guiada al laboratorio de Hielos del Instituto de estructura de la Materia.
XII Semana de la Ciencia de la Comunidad de Madrid.
IEM-CSIC.
8th of November 2012.

5.5.4 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

José Carlos Canalda Cámara and Daniel E. Martínez Tong.

La material condensada blanda: Tú día a día. ¿Acaso no lo sabías? XII Semana de la Ciencia.
Instituto de Estructura de la Materia CSIC, Madrid.
7th of November 2012.

5.6 TRANSFERENCIA DE TECNOLOGÍA / TRANSFER OF TECHNOLOGY

5.6.1 DPTO. DE ESPECTROSCOPIA NUCLEAR, VIBRACIONAL Y MATERIA DESORDENADA / NUCLEAR, VIBRATIONAL AND DESORDERED MEDIA SPECTROSCOPY

Reuniones de transferencia de tecnología

Meeting attendees: José A. Sánchez Gil.

Collaboration: Consolider EMET Workshop Industrial.

Place: Madrid, Ministerio de Economía y Competitividad.

Date: 11th of December 2012.

Patentes

Inventors: Santiago Sánchez-Cortés, Irene Izquierdo-Lorenzo and Jose V. García-Ramos.

Title: Nanopartículas de Plata funcionalizadas con Ditiocarbamato de Ciclodextrina, y su uso en la Detección Ultrasensible de Compuestos.

Nº of request: P201230756.

Country of priority: Spain.

Date of application: 21st of May 2012.

Owner entity: CSIC.

5.6.2 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

Reuniones de transferencia de tecnología

Meeting attends: Tiberio A. Ezquerro.

Collaboration: FAE, S.A.

Place: Hospitalet de Llobregat (Barcelona).

Date: 14th of June 2012.

Meeting attends: Juan Francisco Vega Borrego and Javier Martínez de Salazar Bascuñana.

Collaboration: Dow Chemicals Ibérica.

Place: Tarragona.

Date: 17th-18th of December 2012.

Conferencias de transferencia tecnológica impartidas u organizadas por el Instituto

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

Title: Compositional dependence of linear viscoelastic properties of blends of polyolefins. Final Report.

Collaboration: IEM/Dow Chemicals Ibérica.

Place: Dow Chemicals Ibérica (Tarragona).

Dates: 19th of December 2012.

Speakers: Ernesto Vicente Alique and Juan Francisco Vega Borrego.

Title: Compositional dependence of linear viscoelastic properties of blends of polyolefins I.

Collaboration: IEM/Dow Chemicals Ibérica.

Place: Instituto de Estructura de la Materia (Madrid).

Dates: 24th of May 2012.

Speakers: Ernesto Vicente Alique and Juan Francisco Vega Borrego.

Title: Compositional dependence of linear viscoelastic properties of blends of polyolefins II.

Collaboration: IEM/Dow Chemicals Ibérica.

Place: Instituto de Estructura de la Materia (Madrid).

Dates: 28th of September 2012.

Informes de transferencia tecnológica

Ernesto Vicente Alique, Juan Francisco Vega Borrego and Javier Martínez de Salazar Bascañana.
Compositional dependence of the melt linear viscoelastic properties of blends of polyolefins I
Dow Chemicals Ibérica, Tarragona (May 2012).

Rafael Núñez Ramírez, Ernesto Vicente Alique, Juan Francisco Vega Borrego and Javier Martínez de Salazar Bascañana.
Biophysical studies of VLP and gp proteins.
Sino Biological Ltd., Beijing, China (July 2012).

Ernesto Vicente Alique, Juan Francisco Vega Borrego and Javier Martínez de Salazar Bascañana.
Compositional dependence of the melt linear viscoelastic properties of blends of polyolefins II
Dow Chemicals Ibérica, Tarragona (September 2012).

Juan Francisco Vega Borrego and Javier Martínez de Salazar Bascañana.
Compositional study of physical properties of polyethylene blends. Final Report
Dow Chemicals Ibérica, Tarragona (December 2012).

Javier Ramos Díaz.
Monte Carlo code to simulate short branched polyethylenes developed and implemented by Dr. J. Ramos, Dr. L. Peristeras and Prof. D. Theodoro, is being evaluated by the Department of Materials Science Laboratory of Mitsui Mitsui Chemicals, Japan (January 2012).

5.6.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS

Patentes

Authors: Isabel Tanarro Onrubia, Belén Maté Naya and Miguel Ángel Moreno Alba.
Title: “Procedimiento y sistema de deposición en condiciones de alto vacío de sustancias con muy baja presión de vapor sobre sustratos fríos”.
Application to the Spanish Patent and Trademark Office. Application Number: 201230303.
Date: 29th February 2012.

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

Unidades asociadas / Associated Units

- Unit associate *Physical Nuclear Group*, between the IEM, CSIC (responsible for Pedro Sarriguren Suquilbide) and the Dept. of physical Atomic, Molecular and Nuclear from the Complutense University of Madrid (responsible for E. Moya Valgañón), renewed for the period 2011-2013.

5.7.2 DPTO. DE ESPECTROSCOPIA NUCLEAR, VIBRACIONAL Y MATERIA DESORDENADA / NUCLEAR, VIBRATIONAL AND DISORDERED MEDIA SPECTROSCOPY

Unidades asociadas / Associated Units

- Associated Unit between IEM, CSIC (Head of Department, Santiago Sánchez Cortés) and the Spectroscopy and Molecular Structure Group of the Department of Chemistry-Physics, University of Malaga, (Head of Department, Juan Carlos Otero), renewed for the period 2009-2012.

- Associated Unit between IEM, CSIC (Head of Department, Concepción Domingo Maroto) and the Spectroscopy and Molecular Structure Group of the Department of Condensed Matter Physics, Crystallography and Mineralogy, University of Valladolid (Head of Department, José Antonio de Saja), renewed for the period 2009-2012.

Otras actividades / Other activities

José Vicente García Ramos.

- Chair of Doctoral Thesis Board at University of Valladolid, 9th of May 2012.
- Chair of Doctoral Thesis Board at University of Coimbra (Portugal), 14th -15th of December 2012.

5.7.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS

Unidades Asociadas / Associated Units

- "Molecular Physical Chemistry", comprising IEM-CSIC, IQFR-CSIC, IFF-CSIC (Victor J. Herrero) and Dpto. of Química Física I, Universidad Complutense de Madrid (F. Javier Aoiz), renewed for 2012-2015.

Otras actividades / Other activities

Dionisio Bermejo.

- *Groupe de recherche internationale (GDRI)*, HiResMIR (High Resolution Microwave), Infraered and Raman molecular spectroscopy for atmospheric, planetologic and astrophysical applications.

José Luis Doménech.

- President of Court of thesis at the Universidad Pablo de Olavide (Seville), 28th of June 2012)

Víctor J. Herrero. Short stays:

- Universidad de Valladolid, Grupo de Espectroscopía Molecular, Abril 10th ,2012
- University of Leiden, Leiden Observatory. Sackler Laboratory for Astrophysics, The Netehrlands, 30th of May 2nd of June 2012.

Belén Maté. Short stays:

- o University of Leiden, Leiden Observatory. Sackler Laboratory for Astrophysics, the Netehrlands, May 30th of May-2nd of June 2012.

5.7.4 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

Otras actividades / Other activities

Aurora Nogales Ruíz. Short stays:

- o Visit to the installations of the "Lawrence Berkeley National Laboratory" and "Stanford Synchrotron Radiation Lightsource", 1st-4th of April 2012.
- o Member of the Court's doctoral thesis at the University of the Pais Vasco, San Sebastian, 16th -17th of April 2012.
- o Experimentation online BW4 of synchrotron DESY/HASYLAB, Hamburg, Germany, 24th -28th of May 2012.
- o Measures in the NCD command-line synchrotron ALBA, Barcelona, 9th -13th of July 2012.
- o Measures on-line P10 PETRA III synchrotron, Hamburg, Germany, 15th -18th of July 2012.
- o Member of the Court's doctoral thesis at the Universidad Complutense de Madrid, 21st of June 2012.

Francisco J. Baltá Calleja. Short stays:

- o Measurements in the synchrotron PETRA/HASYLAB, Hamburg, Germany, 3rd -11th of September 2012.
- o Scientific collaboration with the University of Sétif and the University of Oran, and delivery of two conferences, Setif/Oran, Algeria, 5th -12th of November 2012.

Tiberio Ezquerro Sanz. Short stays:

- o Visit to the installations of the "Lawrence Berkeley National Laboratory" and "Stanford Synchrotron Radiation Lightsource", 1st -4th of April 2012.

- Experimentation on-line BW4 synchrotron DESY/HASYLAB, Hamburg, Germany, 24th-28th of May 2012.
- Meeting of technology transfer with the company FAE, Barcelona, 14th of June 2012.
- Measures in the NCD line of the ALBA synchrotron, Barcelona, 9th-12th of July 2012.
- Measures on-line P10 PETRA III synchrotron, Hamburg, Germany, 15th-19th of July 2012.
- Member Court of doctoral thesis, Universidad Politécnic de Cataluña, Barcelona, 23rd of July 2012.
- Court member of doctoral dissertation at the University of Paul Sabatier, Toulouse, France, 8th-9th November 2012.
- Experiments in Sincotron ALBA, Barcelona, 26th-29th of November 2012.
- Experiments in the white room of the National Center for Microtechnology, Barcelona, 26th-29th of November 2012.
- Member Court of doctoral thesis, Universidad de Zaragoza, Zaragoza, 13th-16th of December 2012

Javier Martínez de Salazar Bascuñana. Short stays:

- Presidency thesis Court, Zaragoza, 24th of February 2012.
- Dow Chemical Iberica seminar for presentation of results and negotiation of a possible new contract of collaboration with the IEM, Barcelona-Tarragona, 17th-18th of December 2012.

Fernando Ania García. Short stays:

- Attendance to the seminar of Nano-indentation taught by Dr. W. Oliver at the Centre for research in nanoengineering of the South Diagonal Campus, Universidad de Barcelona, 11th of May 2012.
- Experimental measures radiation synchrotron DESY-PETRA, Hamburg, Germany, 5th-10th of September 2012.

Daniel R. Rueda Bravo. Short stays:

- Experiments at HASYLAB/DESY synchrotron line BW4, Hamburg, Germany, 24th-29th of May 2012.

Araceli Flores Aguilar-Amat.

- Member Court of doctoral thesis, Universidad Complutense de Madrid, 20th of January 2012.
- Attendance to the seminar of Nano-indentation taught by Dr. W. Oliver at the Centre for research in nanoengineering of the South Diagonal Campus, Universidad de Barcelona, 11th of May 2012.

Mari Cruz García-Gutiérrez. Short stays:

- Visit to the installations of the "Laurence Berkeley National Laboratory" and "Stanford Synchrotron Radiation Lightsource", 1st-4th of April 2012.
- Experimentation on-line BW4 synchrotron DESY/HASYLAB, Hamburg, Germany, 24th-28th of May 2012. .
- Measures in the NCD line of the ALBA synchrotron, Barcelona, 9th-13th of July 2012.
- Member of the Court's doctoral thesis at the University of Haute-Alsace, and meeting with potential scientific collaborators, Mulhouse, France, 15th-16th of November 2012.
- Use of the clean room of the National Center of microelectronics (CNM) for the preparation of polymers printing and lithographic moulds, Barcelona, 26th-29th of November 2012.

Juan Francisco Vega Borrego.

- Dow Chemical Iberica seminar for presentation of results and negotiation of a possible new contract of collaboration with the IEM, Barcelona-Tarragona, 17th-18th of December 2012.

Michelina Soccio.

- Preparation of samples for the realization of lithographic molds and impression on polymers in the White Hall of the National Center of microelectronics in Barcelona, 11th-17th of March 2012.
- Experimentation on-line BW4 synchrotron DESY/HASYLAB, Hamburg, Germany, 24th-28th of May 2012.
- Use of the clean room of the National Center of microelectronics (CNM) for the preparation of polymers printing and lithographic moulds, Barcelona, 26th-29th of November 2012.

Ignacio Martín-Fabiani Carrato. Short stays:

- Visit to the installations of the "Laurence Berkeley National Laboratory" and "Stanford Synchrotron Radiation Lightsource", 1st-4th of April 2012.

José Carlos Canalda Cámara.

- Measures in the NCD line of the ALBA synchrotron, Barcelona, 9th-13th of July 2012.

TEM-BIOPHYM facility

- In the installation of transmission electron microscopy is carried out, as well as an important part of the scientific activity of the BIOPHYM, support to the investigation of other teams work both of the Institute structure of matter as other institutions such as the Institute of Chemical Physics Rocasolano and the Institute of science and technology of polymers.
- There is a large group of users, associated through the web page of the BIOPHYM group, with which periodic meetings are held (<http://www.gemppo.iem.csic.es/tem/>).
- It should be noted that the results of these tasks of support have resulted 4 scientific publications in 2012, accumulating a total of 9 publications in the past two years, as well as several presentations at national and international conferences. Additionally, the results are part of the research projects that are developed in several doctoral theses.

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. M. Abella, E. Vicente, A. Rodríguez-Ruano, S. Espana, E. Lage, M. Desco, JM. Udias, and JJ. Vaquero.
Misalignments calibration in small-animal PET scanners based on rotating planar detectors and parallel-beam geometry.
Physics in Medicine and Biology **57**, p.7493 (2012).
2. M. Albers, N. Warr, K. Nomura, A. Blazhev, J. Jolie, D. Mücher, B. Bastin, C. Bauer, C. Bernards, L. Bettermann, V. Bildstein, J. Butterworth, M. Cappellazzo, J. Cederkäll, D. Cline, I. Darby, S. Das Gupta, J. M. Daugas, T. Davinson, H. De Witte, J. Diriken, D. Filipescu, E. Fiori, C. Fransen, L. P. Gaffney, G. Georgiev, R. Gernhäuser, M. Hackstein, S. Heinze, H. Hess, M. Huyse, D. Jenkins, J. Konki, M. Kowalczyk, T. Kröll, R. Krücken, J. Litzinger, R. Lutter, N. Marginean, C. Mihai, K. Moschner, P. Napiorkowski, B. S. Nara Singh, K. Nowak, T. Otsuka, J. Pakarinen, M. Pfeiffer, D. Radeck, P. Reiter, S. Rigby, L. M. Robledo, R. Rodríguez-Guzmán, M. Rudigier, P. Sarriguren, M. Scheck, M. Seidlitz, B. Siebeck, G. Simpson, P. Thöle, T. Thomas, J. Van de Walle, P. Van Duppen, M. Vermeulen, D. Voulot, R. Wadsworth, F. Wenander, K. Wimmer, K. O. Zell, and M. Zielinska.
Evidence for a smooth onset of deformation in the neutron-rich Kr isotopes.
Physical Review Letters **108**, 062701 (2012).
3. R. Álvarez-Rodríguez, A.S. Jensen, E. Garrido and D.V. Fedorov.
Three-particle decays of light-nuclei resonances.
Physica Scripta T **150**, 014002 (2012).
4. L.C. Barbado, C. Barcelo and L.J. Garay.
Hawking Radiation as Perceived by Different Observers: an Analytic Expression for the Effective-Temperature Function.
Classical and Quantum Gravity **29**, 075013 (2012).
5. C. Barceló, R. Carballo and Luis J. Garay.
Two Formalisms, One Renormalized Stress-energy Tensor.
Physical Review D **85**, 084001 (2012).
6. C. Barceló, R. Carballo-Rubio, L. J. Garay and R. Gomez-Escalante.
Hybrid Classical-Quantum Formulations Ask for Hybrid Notions.
Physical Review A **86**, 042120 (2012).
7. M. Bouhmadi-López, P. Chen and Y.W. Liu.
Scalar Perturbations from Brane-World Inflation with Curvature Effects.
Physical Review D **86**, 083531 (2012).
8. G. Calcagni.
Geometry of Fractional Spaces.
Advances in Theoretical and Mathematical Physics **16**, 549 (2012).
9. G. Calcagni, G. Nardelli and M. Scalisi.
Quantum mechanics in fractional and other anomalous spacetimes.
Journal of Mathematical Physics **53**, 102110 (2012).
10. L. Castelló Gomar, J. Cortez, D. Martín-de Blas, G.A. Mena Marugán and J. M. Velhinho.
Uniqueness of the Fock Quantization of Scalar Fields in Spatially Flat Cosmological Spacetimes.
Journal of Cosmology and Astroparticle Physics **11**, 001 (2012).
11. M. Carvajal, O. Álvarez-Bajo, M.L. Senent, R. Domínguez-Gómez and M. Villa.

- Raman and infrared spectra of dimethyl ether C-13-isotopologue ((CH₃OCH₃)-C-13) from a CCSD(T) potential energy surface.*
Journal of Molecular Spectroscopy **279**, 3 (2012).
12. J. Cortez, G.A. Mena Marugán, J. Olmedo and J.M. Velhinho.
Criteria for the Determination of Time Dependent Scalings in the Fock Quantization of Scalar Fields with a Time Dependent Mass in Ultrastatic Spacetimes.
Physical Review D **86**, 104003 (2012).
 13. F. Dumouchel, A. Spielfieldel, M.L. Senent and N. Feautrier.
Temperature dependence of rotational excitation rate coefficients of C₂H in collision with He.
Chemical Physics Letters **533**, 6 (2012).
 14. M. Fernández Méndez, G.A. Mena Marugán and J. Olmedo.
Hybrid Quantization of an Inflationary Universe.
Physical Review D **86**, 024003 (2012).
 15. M. Fernández Méndez, G.A. Mena Marugán, J. Olmedo and J.M. Velhinho.
Unique Fock Quantization of Scalar Cosmological Perturbations.
Physical Review D **85**, 103525 (2012).
 16. M.K. Gaidarov, A.N. Antonov, P. Sarriguren and E. Moya de Guerra
Nuclear Matter Properties of Deformed Neutron-Rich Exotic Nuclei
Nuclear Theory **31**, p.125 (2012)
 17. M.K. Gaidarov, A.N. Antonov, P. Sarriguren and E. Moya de Guerra.
Symmetry energy of deformed neutron-rich nuclei.
Physical Review C **85**, 064319 (2012).
 18. E. Garrido, A.S. Jensen, D.V. Fedorov and J.G. Johansen.
Three-body properties of low-lying ¹²Be resonances.
Physical Review C **86**, 024310 (2012).
 19. E. Garrido, C. Romero-Redondo, A. Kievsky and M. Viviani.
Integral relations and the adiabatic expansion method for 1+2 reactions above the breakup threshold: Helium trimers with soft-core potentials.
Physical Review A **86**, 052709 (2012).
 20. E. Garrido, A.S. Jensen and D.V. Fedorov.
Inelastic cross sections and continuum transitions illustrated by ⁸Be results.
Physical Review C **86**, 064608 (2012).
 21. AL. Goertzen, QN. Bao, M. Bergeron, E. Blankemeyer, S. Blinder, M. Canadas, AF. Chatzioannou, K. Dinelle, E. Elhami, HS. Jans, E. Lage, R. Lecomte, V. Sossi, S. Surti, YC. Tai, JJ. Vaquero, E. Vicente, DA. Williams and R. Laforest.
NEMA NU 4-2008 Comparison of Preclinical PET Imaging Systems.
Journal of Nuclear Medicine **53**, p.1300 (2012).
 22. J. González.
Electron self-energy effects on chiral symmetry breaking in graphene.
Physical Review B **85**, 085420 (2012).
 23. J. González.
Higher-order renormalization of graphene many-body theory.
Journal of High Energy Physics **08**, 27 (2012).
 24. D. Hammoutene, M. Hochlaf and M.L. Senent.
Structure and electronic spectra of the C₆⁻ anion.
Monthly Notices of the Royal Astronomical Society **424**, 1224 (2012).

25. N. Inostroza and M.L. Senent.
Large amplitude vibrations of Urea in gas phase.
Chemical Physics Letters **524**, 25 (2012).
26. E. Martín Martínez, L.J. Garay and J. León.
The Fate of Non-Trivial Entanglement under a Gravitational Collapse.
Classical and Quantum Gravity **29**, 224006 (2012).
27. R.A. Molina, D. Weinmann, Ph. Jacquod and R.A. Jalabert.
Scattering phase of quantum dots: Emergence of universal behavior.
Physical Review Letters **108**, 076803 (2012).
28. T.S. Pereira, S. Carneiro and G.A. Mena Marugán.
Inflationary Perturbations in Anisotropic, Shear-Free Universes.
Journal of Cosmology and Astroparticle Physics **5**, 040 (2012).
29. E. Prada, P. San-José and R. Aguado.
Transport spectroscopy of N-S nanowire junctions with Majorana fermions.
Physical Review B **86**, 180503 (2012).
30. R. Rodríguez-Guzmán, L.M. Robledo and P. Sarriguren.
Microscopic description of quadrupole-octupole coupling in Sm and Gd isotopes with the Gogny energy density functional.
Physical Review C **86**, 034336 (2012).
31. P. San-José, J. González and F. Guinea.
Non-Abelian gauge potentials in graphene bilayers.
Physical Review Letters **108**, 216802 (2012).
32. P. San-José, E. Prada, H. Schomerus and S. Kohler.
Laser-induced quantum pumping in graphene.
Applied Physics Letters **101**, 153506 (2012).
33. P. San-José, E. Prada and R. Aguado.
AC Josephson effect in finite-length nanowire junctions with Majorana modes.
Physical Review Letters **108**, 257001 (2012).
34. M.A. Sanchís Lozano, J. Fernando Barbero G. and José Navarro Salas.
Prime numbers, quantum field theory and the Goldbach conjecture.
International Journal of Modern Physics A **27**, 1250136 (2012).
35. N. Sandulescu, D. Negrea, J. Dukelsky and C.W. Johnson.
Quartet condensation and isovector pairing correlations in N=Z Nuclei.
Physical Review C **85**, 061303 (2012).
36. P. Sarriguren.
Deformation effects on the Gamow-Teller strength distributions in the double-beta decay partners ^{76}Ge and ^{76}Se .
Physical Review C **86**, 034335 (2012).
37. M.L. Senent, F. Damouchel and F. Lique.
Cyanide/isocyanide abundances in the interstellar medium - I. Theoretical spectroscopic characterization.
Monthly Notices of the Royal Astronomical Society **420**, 1188 (2012).
38. M.L. Senent, R. Domínguez-Gómez, M. Carvajal and M. Villa.
CCSD(T) study of $\text{CD}_3\text{-O-CD}_3$ and $\text{CH}_3\text{-O-CD}_3$ infrared and Raman spectra.
Journal of Physical Chemistry A **116**, 6901 (2012).
39. A.G. Smith, J.L. Durell, W.R. Phillips, W. Urban and P. Sarriguren.
Lifetime measurements and nuclear deformation in the A=100 region.

Physical Review C **86**, 014321 (2012).

40. A. Spielfiedel, N. Feautrier, F. Najar, D. Ben Abdallah, F. Dayou, M.L. Senent and F. Lique.
Fine and hyperfine excitation of C₂H by collisions with He at low temperatures.
Monthly Notices of the Royal Astronomical Society **421**, 1891 (2012).
41. O. Yazidi, A. Ben Houria and Z. Ben Lakhdar, M.L. Senent and M. Hochlaf.
Electronic structure and spectroscopy of MgO³⁺ cation.
Journal of Chemical Physics **136**, 024316 (2012).

PROCEEDINGS ISI / ISI PROCEEDINGS

42. Iván Agulló, J. Fernando Barbero G., Jacobo Díaz Polo, Enrique Fernández Borja and Eduardo J. S. Villaseñor.
Black Hole Entropy in Loop Quantum Gravity.
Journal of Physics Conference Series **360**, 012035 (2012).
43. Luis C. Barbado, Carlos Barceló and Luis J. Garay.
Hawking Radiation as Perceived by Different Observers.
AIP Conference Proceedings **1458**, 363 (2012).
44. J. Fernando Barbero G.
Black holes: combinatorics and the thermodynamic limit.
AIP Conference Proceedings **1458**, 23 (2012).
45. G. Calcagni.
Introduction to Multifractional Spacetimes.
AIP Conference Proceedings **1483**, 31 (2012).
46. J. Dukelsky.
Integrable Richardson-Gaudin models in mesoscopic physics.
Journal of Physics Conference Series **338**, 012023 (2012).
47. J. Dukelsky and S. Lerma.
New realizations of the Richardson-Gaudin models in nuclear physics: the hyperbolic model.
AIP Conference Proceedings **1488**, 182 (2012).
48. J. E. García-Ramos, J. M. Arias, P. Cejnar, J. Dukelsky, P. Pérez-Fernández and A. Relaño.
Decoherence and quantum quenches: their relationship with excited state quantum phase transitions.
AIP Conference Proceedings **1488**, 309 (2012).
49. M. Martín-Benito, L.J Garay, G.A. Mena Marugán and E. Wilson-Ewing.
Loop Quantum Cosmology of the Bianchi I Model: Complete Quantization.
Journal of Physics Conference Series **360**, 012031 (2012).
50. D. Martin-de Blas, M. Martin Benito and G.A. Mena Marugán.
Inclusion of Matter in Inhomogeneous Loop Quantum Cosmology.
AIP Conference Proceedings **1458**, 467 (2012).
51. D. Martin-de Blas, M. Martin-Benito and G.A. Mena Marugán.
Inhomogeneous Loop Quantum Cosmology with Matter.
Journal of Physics Conference Series **360**, 012032 (2012).
52. R.A. Molina, P. Schmitteckert, D. Weinmann, R.A. Jalabert and Ph. Jacquod.
Embedding method for the scattering phase in strongly correlated quantum dots.
Journal of Physics Conference Series **338**, 012011 (2012).
53. E. Moya de Guerra, O. Moreno, P. Sarriguren and M. Ramón.
Topics on Nuclear Structure with Electroweak Probes.
Journal of Physics Conference Series **366**, 012011 (2012).

54. J. Olmedo, M. Fernández Méndez and G.A. Mena Marugán.
A complete Hybrid Quantization in Inhomogeneous Cosmology.
AIP Conference Proceedings **1458**, 507 (2012).
55. J. Olmedo, M. Fernández-Méndez and G.A. Mena Marugán.
Inflation and Inhomogeneities: A Hybrid Quantization.
Journal of Physics Conference Series **360**, 012033 (2012).
56. P. Pérez-Fernández, A. Relaño, P. Cejnar, J.M. Arias, J. Dukelsky and J.E. García-Ramos.
Excited state quantum phase transitions and chaos in the Dicke model.
AIP Conference Proceedings **1488**, 318 (2012).
57. N. Sandulescu, D. Negrea, J. Dukelsky and C. W. Johnson.
Isovector Pairing and Quartet Condensation In N=Z Nuclei.
AIP Conference Proceedings **1498**, 359 (2012).
58. P. Sarriguren.
Weak decay rates for waiting-point nuclei involved in the rp process.
Journal of Physics Conference Series **366**, 012039 (2012).
59. P. Sarriguren, R. Rodríguez-Guzmán and L.M. Robledo.
Nuclear shape transitions in neutron-rich medium-mass nuclei.
AIP Conference Proceedings **1491**, 105 (2012).

6.1.2 DPTO. DE ESPECTROSCOPIA NUCLEAR, VIBRACIONAL Y MATERIA DESORDENADA / NUCLEAR, VIBRATIONAL AND DESORDERED MEDIA SPECTROSCOPY

60. M. Alcorta, M.J.G. Borge, M. Cubero, C.A. Diget, R. Domínguez-Reyes, L.M. Fraile, B.R. Fulton, H.O.U. Fynbo, D. Galaviz, S. Hyldegaard, H. Jeppesen, B. Jonson, O.S. Kirsebom, M. Madurga, A. Maira, A. Muñoz-Martín, T. Nilsson, G. Nyman, D. Obradors, A. Perea, K. Riisager, O. Tengblad and M. Turrion.
Properties of ^{12}C resonances determined from the $^{10}\text{B}(\beta\text{He}, p\alpha\alpha)$ and $^{11}\text{B}(\beta\text{He}, d\alpha\alpha)$ reactions studied in complete kinematics.
Physical Review C **86**, 064306 (2012).
61. S. Akkoyun, A. Algora, B. Alikhani, F. Ameil, G. de Angelis, L. Arnold, A. Astier, A. Ataç, Y. Aubert, C. Aufranc, A. Austin, S. Aydin, ... A. Jungclaus et al.
AGATA – Advanced GAMMA Tracking Array.
Nuclear Instruments and Methods A **668**, 26 (2012).
62. M.T. Blanco-Varela, P.M. Carmona-Quiroga, I.F. Sáez Del Bosque and S. Martínez-Ramírez.
Role of organic admixtures on thaumasite precipitation.
Cement and Concrete Research **42**, p.994 (2012).
63. PG. Bizzeti, G. de Angelis, SM. Lenzi and R. Orlandi.
Isospin symmetry violation in mirror E1 transitions: Coherent contributions from the giant isovector monopole resonance in the As-67-Se-67 doublet.
Physical Review C - Nuclear Physics **86**, 044311 (2012)
64. M.V. Cañamares, S. Sánchez-Cortés and S. Martínez-Ramírez.
Structural characterization of a 3rd generation commercial cement superplasticizer by Raman spectroscopy and DFT calculations.
Journal of Raman Spectroscopy, **43**, p.1623 (2012).
65. M. Carmona-Gallardo, B.S. Nara Singh, M.J.G. Borge, J.A. Briz, M. Cubero, B.R. Fulton, H. Fynbo, N. Gordillo, M. Hass, G. Haquin, A. Maira, E. Nacher, Y. Nir-El, V. Kumar, J. McGrath, A. Muñoz-Martín, A. Perea, V. Pseudo, G. Ribeiro, J. Sánchez Del Rio, O. Tengblad, R. Yaniv and Z. Yungreis.
New measurement of the $^3\text{He}(\alpha, \gamma)^7\text{Be}$ cross section at medium energies.
Physical Review C **86**, 032801 (2012).

66. P. Carmona, M. Molina, M. Calero, F. Bermejo-Pareja, P. Martínez-Martín, I. Álvarez and A. Toledano.
Infrared spectroscopic analysis of mononuclear leukocytes in peripheral blood from Alzheimer's disease patients.
Analytical and Bioanalytical Chemistry **402**, p.2015 (2012).
67. M. Cubero, J.P. Fernández-García, M. Rodríguez-Gallardo, L. Acosta, M. Alcorta, M.A.G. Álvarez, M.J.G. Borge, L. Buchmann, C.A. Diget, H.A. Falou, B.R. Fulton, H.O.U. Fynbo, D. Galaviz, J. Gómez-Camacho, R. Kanungo, J.A. Lay, M. Madurga, I. Martel, A.M. Moro, I. Mukha, T. Nilsson, A.M. Sánchez-Benítez, A. Shotton, O. Tengblad and P. Walden.
Do Halo Nuclei Follow Rutherford Elastic Scattering at Energies Below the Barrier? The case of ^{11}Li .
Physical Review Letters **109**, 262701(2012).
68. M. E. Defonsi Lestard, S.B. Diaz, M. E. Tuttolomondo, S. Sánchez-Cortés, M. Puiatti, A. B. Pierini, A. Ben Altabef.
Interaction of S-methyl methanethiosulfonate with DPPC bilayer.
Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy **97**, p.479 (2012).
69. A. Di Pietro, V. Scuderi, A.M. Moro, L. Acosta, F. Amorini, M.J.G. Borge, P. Filguera, M. Fisichella, L.M. Fraile, J. Gomez-Camacho, H. Jeppesen, M. Lattuada, I. Martel, M. Milin, A. Musumarra, M. Papa, M.G. Pellegriti, F. Pérez-Bernal, R. Raabe, G. Randisi, F. Rizzo, G. Scalia, O. Tengblad, D. Torresi, A.M. Vidal, D. Voulot, F. Wenander and M. Zadro.
Experimental study of the collision $^{11}\text{Be} + ^{64}\text{Zn}$ around the Coulomb barrier.
Physical Review C - Nuclear Physics **85**, 054607 (2012).
70. G. Fabriciova, E. López-Tobar, M.V. Cañamares, M. Backor and S. Sánchez-Cortés.
Adsorption of the Anthraquinone Drug Parietin on Silver Nanoparticles a SERS and Fluorescence Study.
Vibrational Spectroscopy, **63**, p.477 (2012).
71. F. Fernandez-Alonso, C. Cabrillo, R. Fernández-Perea, F.J. Bermejo, M.A. González, C. Mondelli, and E. Farhi.
Solid para-hydrogen as the paradigmatic quantum crystal: Three observables probed by ultrahigh-resolution neutron spectroscopy.
Physical Review B **86**, 144524 (2012).
72. L. Fernández-Carrasco, D. Torrens, S. Martínez-Ramírez.
Carbonation of ternary building cements materials.
Cement and Concrete Composites **34**, p.1180 (2012).
73. E. Fiori, G. Georgiev, A.E. Stuchbery, A. Jungclaus, D.L. Balabanski, A. Blazhev, S. Cabaret, E. Clement, M. Danchev, J.M. Daugas, S. Grevy, M. Hass, V. Kumar, J. Leske, R. Lozeva, S. Lukyanov, T.J. Mertzimekis, V. Modamio, B. Mougnot, F. Nowacki, Yu.E. Penionzhkevich, L. Perrot, N. Pietralla, K. Sieja, K.-H. Speidel, I. Stefan, C. Stodel, J.C. Thomas, J. Walker and K.O. Zell.
First $g(2+)$ measurement on neutron-rich ^{72}Zn , and the high-velocity transient field technique for radioactive heavy-ion beams.
Physical Review C **85**, 034334 (2012).
74. MA. Fraser, F. Zocca, RM. Jones, M. Pasini, PA. Posocco, D. Voulot and F. Wenander.
Longitudinal emittance measurements at REX-ISOLDE.
Nuclear Instruments & Methods in Physics Research Section A-Accelerators Spectrometers Detectors and Associated Equipment **663**, p.1 (2012)
75. J.M. Geffrin, B. García-Cámara, R. Gómez-Medina, P. Albella, L.S. Froufe-Pérez, C. Eyraud, A. Litman, R. Vaillon, F. González, M. Nieto-Vesperinas, J. J. Sáenz, and F. Moreno.
Magnetic and electric coherence in forward- and back-scattered electromagnetic waves by a single dielectric subwavelength sphere.
Nature Communications **3**, 1171 (2012).
76. M. Grieser, A. Litvinov, R. Raabe, K. Blaum, Y. Blumenfeld, PA. Butler, F. Wenander, PJ. Woods, M. Aliotta, A. Andreyev, A. Artemyev, D. Atanasov, T. Aumann, D. Balabanski, A. Barzakh, L. Batist, AP. Bernardes, D. Bernhardt, J. Billowes, S. Bishop, M. Borge, I. Borzov, F. Bosch, AJ. Boston, C. Brandau,

- W. Catford, R. Catherall, J. Cederkall, D. Cullen, T. Davinson, I. Dillmann, C. Dimopoulou, G. Dracoulis, E. Duellmann, Ch. P. Egelhof, A. Estrade, D. Fischer, K. Flanagan, L. Fraile, MA. Fraser, SJ: Freeman, H. Geissel, J. Gerl, P. Greenlees, RE. Grisenti, D. Habs, R. von Hahn, S. Hagmann, M. Hausmann, JJ. He, M. Heil, M. Huysse, D. Jenkins, A. Jokinen, B. Jonson, DT. Joss, Y. Kadi, N. Kalantar-Nayestanaki, BP. Kay, O. Kiselev, HJ. Kluge, M. Kowalska, C. Kozhuharov, S. Kreim, T. Kroell, J. Kurcewicz, M. Labiche, RC. Lemmon, M. Lestinsky, G. Lotay, XW. Ma, M. Marta, J. Meng, D. Muecher, I. Mukha, Mueller, A. St J. Murphy, G. Neyens, T. Nilsson, C. Nociforo, W. Noertershaeuser, RD. Page, M. Pasini, N. Petridis, N. Pietralla, M. Pfuetzner, Z. Podolyak, P. Regan, MW. Reed, R. Reifarth, P. Reiter, R. Repnow, K. Riisager, B. Rubio, MS. Sanjari, DW. Savin, C. Scheidenberger, S. Schippers, D. Schneider, R. Schuch, D. Schwalm, L. Schweikhard, D. Shubina, E. Siesling, H. Simon, J. Simpson, J. Smith, K. Sonnabend, M. Steck, T. Stora, T. Stoehlker, B. Sun, A. Surzhykov, F. Suzuki, O. Tarasov, S. Trotsenko, XL. Tu, P. Van Duppen, C. Volpe, D. Voulot, PM. Walker, E. Wildner, N. Winckler, DFA. Winters, D. F. A. Wolf, HS. Xu, A. Yakushev, T. Yamaguchi, YJ. Yuan, YH. Zhang and K. Zuber.
Storage ring at HIE-ISOLDE Technical design report.
 European Physical Journal: Special Topics **207**, p.1 (2012).
77. G. Grzela, R. Paniagua-Domínguez, T. Barten, Y. Fontana, J.A. Sánchez-Gil, and J. Gómez Rivas.
Nanowire Antenna Emission.
 Nano Letters **12**, p.5481 (2012).
78. A.M. Herrero, P. Carmona, T. Pintado, F. Jiménez-Colmenero and C. Ruiz-Capillas.
Lipid and protein structure analysis of frankfurters formulated with olive oi-in-water emulsion as animal fat replacer.
 Food Chemistry **135**, p.133 (2012).
79. N. Husillos Rodríguez, R.J. Granados, M.T. Blanco-Varela, J.L. Cortina, S. Martínez-Ramírez, M. Marsal, M. Guillem, J. Puig, C.Fos, E. Larrotcha and J. Flores.
Evaluation of a lime-mediated sewage sludge stabilisation process. Product characterisation and technological validation for its use in the cement industry.
 Waste Management **32**, p.550 (2012).
80. J. Igea, P. Lapuente, S. Martínez-Ramírez and M.T. Blanco-Varela.
Characterization of Mudejar mortars from St. Gil abbot church (Zaragoza, Sspain): investigation of the technology of ancient gypsum mortars.
 Materiales de Construcción **62**, p.515 (2012).
81. Z. Jurasekova, C. Domingo, J.V. García-Ramos and S. Sánchez-Cortés.
Adsorption and catalysis of flavonoid quercetin on different plasmonic metal nanoparticles monitored by SERS.
 Journal of Raman Spectroscopy **43**, p.1913 (2012).
82. O.S. Kirsebom, M. Alcorta, M.J.G. Borge, M. Cubero, C.A. Diget, L.M. Fraile, B.R. Fulton, H.O.U. Fynbo, D. Galaviz, B. Jonson, M. Madurga, T. Nilsson, G. Nyman, K. Riisager, O. Tengblad and M. Turrión.
Improved limit on direct α decay of the Hoyle state.
 Physical Review Letters **108**, 202501 (2012).
83. O.S. Kirsebom, M. Alcorta, M.J.G. Borge, M. Cubero, H.O.U. Fynbo, M. Madurga and O. Tengblad.
Observation of decay from a state in ^{10}B at 11.48 MeV.
 Physical Review C - Nuclear Physics **85**, 054308 (2012).
84. A.I. Krivchikov, O.A. Korolyuk, I. V. Sharapova, J. LI. Tamarit, F.J. Bermejo, L.C. Pardo, M. Rovira-Esteva, M.D. Ruiz-Martin, A. Jezowski, J. Baran and N.A. Davydova.
Effects of internal molecular degrees of freedom on the thermal conductivity of some glasses and disordered crystals.
 Physical Review B **85**, 014206 (2012).
85. F. López-Tejeira, R. Paniagua-Domínguez, R. Rodríguez-Oliveros and J.A. Sánchez-Gil.
Fano-like interference of plasmon resonances at single rod-shaped nanoantennas.
 New Journal of Physics **14**, 023035 (2012).

86. F. López-Tejeira, R. Paniagua-Domínguez and J.A. Sánchez-Gil.
High-Performance Nanosensors Based on Plasmonic Fano-like Interference: Probing Refractive Index with Individual Nanorice and Nanobelts.
ACS Nano **6**, p.8989 (2012).
87. E. López-Tobar E, G.P. Blanch, M.L. Ruiz del Castillo and S. Sánchez-Cortés.
Encapsulation and isomerization of curcumin with cyclodextrins characterized by electronic and vibrational spectroscopy.
Vibrational Spectroscopy **62**, p.292 (2012).
88. G. Marquínez-Durán, A.M. Sánchez Benítez, I. Martel, R. Berjillos, J. Dueñas, V.V. Parkar, L. Acosta, K. Rusek, M.A.G. Álvarez, J. Gómez-Camacho, M.J.G. Borge, C. Cruz, M. Cubero, V. Pesudo, O. Tengblad, A. Chbihi, J.P. Fernández-García, B. Fernández-Martínez, J.A. Labrador, A.H. Ziad, J.L. Flores, N. Keeley, L. Standylo, I. Strojek, M. Marques, M. Mazzocco, A. Pakou, N. Patronis, D. Pierroutsakou, R. Silvestri, R. Raabe, N. Soic and R. Wolski.
Scattering of ^8He on ^{208}Pb at energies around the coulomb barrier.
Acta Physica Polonica B **43**, p.239 (2012).
89. D. Macías, P.-M. Adam, V. Ruíz-Cortés, R. Rodríguez-Oliveros and J. A. Sánchez-Gil.
Heuristic optimization for the design of plasmonic nanowires with specific resonant and scattering properties.
Optics Express **20**, p.13146 (2012).
90. P. M. Martín-Sánchez, S. Sánchez-Cortés, E. López-Tobar, V. Jurado, F. Bastian, C. Alabouvette and C. Saiz-Jiménez.
The nature of black stains in Lascaux Cave, France, as revealed by surface-enhanced Raman spectroscopy.
Journal of Raman Spectroscopy **43**, p.464 (2012).
91. S. Martínez-Ramírez and L. Fernández-Carrasco.
Carbonation of ternary cement systems.
Construction and Building Materials **27**, p.313 (2012).
92. D. Montanari, S. Leoni, D. Mengoni, JJ. Valiente-Dobon, G. Benzoni, N. Blasi, G. Bocchi, PF. Bortignon, S. Bottoni, A. Bracco, F. Camera, P. Casati, G. Colo, A. Corsi, FCL. Crespi, B. Million, R. Nicolini, O. Wieland, D. Bazzacco, E. Farnea, G. Germogli, A. Gottardo, SM. Lenzi, S. Lunardi, R. Menegazzo, G. Montagnoli, F. Recchia, F. Scarlassara, C. Ur, L. Corradi, G. de Angelis, E. Fioretto, DR. Napoli, R. Orlandi, E. Sahin, A.M. Stefanini, RP. Singh, A. Gadea, S. Szilner, M. Kmiecik, A. Maj, W. Meczynski, A. Dewald, Th. Pissulla and G. Pollarolo.
Gamma spectroscopy of calcium nuclei around doubly magic Ca-48 using heavy-ion transfer reactions
Physical Review C - Nuclear Physics **85**, 044301 (2012)
93. G. Moulá, P. Albella, R. Rodríguez-Oliveros, J. A. Sánchez-Gil, and R.F. Aroca.
Plasmonics and single-molecule detection in evaporated silver-island films.
Annalen der Physik (Berlin) **524**, p.697 (2012).
94. J.L. Neira, P. Sevilla and F. García-Blanco
The C-terminal sterile alpha motif (SAM) domain of human p73 is a highly dynamic protein, which acquires high thermal stability through a decrease in backbone flexibility
Physical Chemistry Chemical Physics **14**, p.10308 (2012).
95. C. Rodríguez-Tajes, D. Cortina-Gil, H. Álvarez-Pol, T. Aumann, E. Benjamim, J. Benlliure, M.J.G. Borge, M. Caamaño, E. Casarejos, A. Chatillon, L.V. Chulkov, K. Eppinger, T. Faestermann, M. Gascón, H. Geissel, R. Gernhäuser, B. Jonson, R. Kanungo, R. Krücken, T. Kurtukian, P. Maierbeck, T. Nilsson, C. Nociforo, C. Pascual-Izarra, A. Perea, D. Pérez-Loureiro, A. Prochazka, S. Schwertel, H. Simon, K. Sümmerer, O. Tengblad, H. Weick, M. Winkler, M.V. Zhukov.
Gamma-ray measurements in the one-neutron knockout of ^{17}C , ^{19}N , ^{21}O and ^{25}F .
European Physical Journal A **48**, 95 (2012).
96. T. Roger, J. Büscher, B. Bastin, O.S. Kirsebom, R. Raabe, M. Alcorta, J. Aystö, M.J.G. Borge, M. Carmona-Gallardo, T.E. Cocolios, J. Cruz, P. Dendooven, L.M. Fraile, H.O.U. Fynbo, D. Galaviz, L.R.

- Gasques, G.S. Giri, M. Huysse, S. Hyldegaard, K. Jungmann, W.L. Kruithof, M. Lantz, A. Perea, K. Riisager, A. Saastamoinen, B. Santra, P.D. Sohani, A.J. Sørensen, O. Tengblad, E. Traykov, D.J. Van Der Hoek, P.V. Duppen, O.O. Versolato and H.W. Wilschut.
Precise Determination of the Unperturbed 8B Neutrino Spectrum.
Physical Review Letters **108**, 162502 (2012).
97. R. Rodríguez-Oliveros and J. A. Sánchez-Gil.
Gold nanostars as thermoplasmonic nanoparticles for optical heating.
Optics Express **19**, p.12208 (2012).
98. M.Rovira-Esteva, N.A. Murugan, L.C. Pardo, S. Busch, J.L. Tamarit, G.J. Cuello and F.J. Bermejo.
Differences in first neighbor orientation behind the anomalies in the low and high density trans-1,2-dichloroethene liquid.
Journal of Chemical Physics **136**, 124514 (2012)
99. L. Rubio Lago, G.A. Amaral, A. Arregui, J. González Vázquez and L. Bañares.
Imaging the molecular channel in acetaldehyde photodissociation: Roaming and transition state mechanisms.
Physical Chemistry Chemical Physics **14**, p.6067 (2012)
100. L. Rubio, B. Samoudi, M. Santos and L. Díaz.
Infrared fluorescence from multiphoton dissociation of vinyl bromide: Emission from the products and the parent molecule.
Journal of Photochemistry & Photobiology A: Chemistry **237**, p.1 (2012).
101. I. Sánchez-Alonso, P. Carmona and M. Careche.
*Vibrational spectroscopic analysis of hake (*Merluccius merluccius L.*) lipids during frozen storage.*
Food Chemistry **132**, p.160 (2012).
102. I. Sánchez-Alonso, I. Martínez, J. Sánchez-Valencia and M. Careche.
*Estimation of freezing storage time and quality changes in hake (*Merluccius merluccius, L.*) by low field NMR.*
Food Chemistry **135**, p.1626 (2012).
103. S. Schwertel, P. Maierbeck, R. Krücken, R. Gernhäuser, T. Kröll, H. Álvarez-Pol, F. Aksouh, T. Aumann, K. Behr, E.A. Benjamim, J. Benlliure, V. Bildstein, M. Böhmer, K. Boretzky, M.J.G. Borge, A. Brünle, A. Bürger, M. Caamaño, E. Casarejos, A. Chatillon, L.V. Chulkov, D. Cortina-Gil, J. Enders, K. Eppinger, T. Faestermann, J. Friese, L. Fabbietti, M. Gascón, H. Geissel, J. Gerl, M. Gorska, P.G. Hansen, B. Jonson, R. Kanungo, O. Kiselev, I. Kojouharov, A. Klimkiewicz, T. Kurtukian, N. Kurz, K. Larsson, T. Le Bleis, K. Mahata, L. Maier, T. Nilsson, C. Nociforo, G. Nyman, C. Pascual-Izarra, A. Perea, D. Pérez, A. Prochazka, C. Rodríguez-Tajes, D. Rossi, H. Schaffner, G. Schrieder, H. Simon, B. Sitar, M. Stanoiu, K. Sümmerer, O. Tengblad, H. Weick, S. Winkler, B.A. Brown, T. Otsuka, J.A. Tostevin, and W.D.M. Rae.
One-neutron knockout from $^{51-55}\text{Sc}$.
The European Physical Journal A **48**, 191 (2012).
104. P.-A. Söderström, F. Recchia, J. Nyberg, A. Gadea, S. M. Lenzi, A. Poves, A. Atac, S. Aydin, D. Bazzacco, P. Bednarczyk, M. Bellato, B. Birkenbach, D. Bortolato, A. J. Boston, H. C. Boston, B. Bruyneel, D. Bucurescu, E. Calore, B. Cedervall, L. Charles, J. Chavas, S. Colosimo, F. C. L. Crespi, D. M. Cullen, G. de Angelis, P. Desesquelles, N. Dosme, G. Duchêne, J. Eberth, E. Farnea, F. Filmer, A. Gørgen, A. Gottardo, J. Grebosz, M. Gulmini, H. Hess, T. A. Hughes, G. Jaworski, J. Jolie, P. Joshi, D. S. Judson, A. Jungclaus, N. Karkour, M. Karolak, R. S. Kempley, A. Khaplanov, W. Korten, J. Ljungvall, S. Lunardi, A. Maj, G. Maron, W. Meczynski, R. Menegazzo, D. Mengoni, C. Michelagnoli, P. Molini, D. R. Napoli, P. J. Nolan, M. Norman, A. Obertelli, Zs. Podolyak, A. Pullia, B. Quintana, N. Redon, P. H. Regan, P. Reiter, A. P. Robinson, E. Sahin, J. Simpson, M. D. Salsac, J. F. Smith, O. Stezowski, Ch. Theisen, D. Tonev, C. Unsworth, C. A. Ur, J. J. Valiente-Dobon and A. Wiens.
High-spin structure in ^{40}K .
Physical Review C **86**, 054320 (2012).
105. T. Steinhardt, J. Eberth, S. Skoda, O. Thelen, R. Schwengner, F. Döna, C. Plettner, H. Schnare, G. de Angelis, D. R. Napoli, E. Farnea, A. Gadea, A. Jungclaus, K. P. Lieb and R. Wadsworth.

Stabilization of prolate deformation at high spin in ^{75}Kr .
Physical Review C **86**, 064310 (2012).

106. C. Vazquez-Calvo, S. Martinez-Ramirez, M. Álvarez De Buergo, R. Fort.
The use of Portable Raman Spectroscopy to identify conservation treatments applied to Heritage stone.
Spectroscopy Letter **45**, p.146 (2012).
107. F. Villate-Guio, F. Lopez-Tejeira, F.J. Garcia-Vidal, L. Martin-Moreno and F. de Leon-Pérez.
Optimal light harvesting structures at optical and infrared frequencies.
Optics Express **20**, p.25441 (2012).
108. F. Zocca, M.A. Fraser, E. Bravin, M. Pasini, D. Voulot and F. Wenander.
Development of a silicon detector monitor for the HIE-ISOLDE superconducting upgrade of the REX-ISOLDE heavy-ion linac.
Nuclear Instruments & Methods in Physics Research Section A-Accelerators Spectrometers Detectors and Associated Equipment **672**, p.21 (2012).

PUBLICACIONES CONJUNTAS CON EL DPTO. DE FM / PUBLICATIONS IN COMMON WITH THE MOLECULAR PHYSICS DEPARTMENT

109. M.L. Roldán, S. Sánchez-Cortés, J.V. García-Ramos and C. Domingo.
Cucurbit[8]uril-stabilized charge transfer complexes with diquat driven by pH: A SERS study.
Physical Chemistry Chemical Physics **14**, p.4935 (2012).
110. M. Hernandez, G. Recio, R. Martin-Palma, J.V. Garcia-Ramos, C. Domingo and P. Sevilla.
Surface enhanced fluorescence of anti-tumoral drug emodin adsorbed on silver nanoparticles and loaded on porous silicon.
Nanoscale Research Letters **7**, 364 (2012).
111. Z. Jurasekova, C. Domingo, J.V. García-Ramos and S. Sánchez-Cortés.
Adsorption and catalysis of flavonoid quercetin on different plasmonic metal nanoparticles monitored by SERS.
Journal of Raman Spectroscopy **43**, p.1913 (2012).
112. E. Rebollar, M. Sanz, S. Pérez, M. Hernández, I. Martín-Fabiani, D.R. Rueda, T.A. Ezquerro, C. Domingo and M. Castillejo.
Gold coatings on polymer Laser Induced Periodic Surface Structures: Assessment as substrates for Surface-Enhanced Raman Scattering.
Physical Chemistry Chemical Physics **14**, p.15699 (2012).

PROCEEDINGS ISI / ISI PROCEEDINGS

113. M.J.G. Borge, M. Cubero, J.P. Fernández-García, L. Acosta, M. Alcorta, M.A.G. Álvarez, L. Buchmann, C.A. Diget, H.A. Falou, B. Fulton, H.O.U. Fynbo, D. Galaviz, J. Gómez-Camacho, R. Kanungo, J.A. Lay, M. Madurga, I. Mukha, T. Nilsson, A.M. Sánchez-Benítez, A. Shotton, O. Tengblad and P. Walden.
Scattering of the halo nucleus ^{11}Li and its core ^9Li on ^{208}Pb at energies around the Coulomb barrier.
Proceedings of the Rutherford Centennial Conference on Nuclear Physics (2011).
Journal of Physics: Conference Series **381**, 012085 (2012).
114. M. Carmona-Gallardo, B.S. Nara Singh, O. Tengblad, M. Hass, M. Alcorta, M.J.G. Borge, J.A. Briz, C. Cruz, M. Cubero, R. Domínguez-Reyes, B.R. Fulton, H. Fynbo, N. Gordillo, G. Haquin, Y. Nir-El, V. Kumar, A. Maira, J. McGrath, A. Muñoz-Martín, A. Perea and Z. Yungreis.
Astrophysical S factor for the $^4\text{He}(\beta^+\text{He}, \gamma)^7\text{Be}$ reaction at medium energies.
Proceedings of the Fifth Conference of the Nuclear Physics in Astrophysics (2011).
Journal of Physics: Conference Series **337**, 012061 (2012).
115. M. Cubero, J. P. Fernández-García, J. A. Lay, L. Acosta, M. Alcorta, M.A.G. Álvarez, M. J. G. Borge, L. Buchmann, C. A. Diget, B. Fulton, D. Galaviz, J. Gómez-Camacho, M. Madurga, I. Martel, A.M. Moro, I. Mukha, T. Nilsson, A. Sánchez-Benítez, A. Shotton, O. Tengblad and P. Walden.
Elastic scattering of the halo nucleus ^{11}Li and its core ^9Li on ^{208}Pb at energies around the Coulomb barrier.

Proceedings of the third international EURORIB Conference-European Radioactive Ion Beam Conference (2012).
AIP Conference Proceedings **1377**, p.338 (2012)

116. M. Hernandez, G. Recio, P. Sevilla, V. Torres-Costa, J.V. Garcia-Ramos, C. Domingo and R.J. Martin-Palma.
Development of drug delivery systems based on nanostructured porous silicon loaded with the anti-tumoral drug emodin adsorbed on silver nanoparticles.
Proceedings of SPIE - The International Society for Optical Engineering **8465**, 846509 (2012)
117. R. Lică, N. Mărginean, D. G. Ghiță, H. Mach, L. M. Fraile, A. Aprahamian, C. Bernards, J. A. Briz, B. Bucher, C. J. Chiara, Z. Dlouhý, I. Gheorghe, P. Hoff, J. Jolie, U. Köster, W. Kurcevic, R. Mărginean, B. Olaizola, V. Pazyi, J. M. Régis, M. Rudigier, T. Sava, G. Simpson, M. Stănoiu, L. Stroe, and W. B. Walters.
Low-lying isomeric state in ^{80}Ga from the β^- decay of ^{80}Zn .
Proceedings of the the second International Nuclear Physics Conference on Nuclear Structure and Dynamics (2012).
AIP Conference Proceedings **1491**, 97 (2012)
118. J. Marganec, F. Aksouh, Y. Aksyutina, H. Álvarez Pol, T. Aumann, S. Beceiro, C. Bertulani, K. Boretzky, M. J. Borge, M. Chartier, A. Chatillon, L. Chulkov, D. Cortina-Gil, I. Egorova, H. Emling, O. Ershova, C. Forssén, L. M. Fraile, H. Fynbo, D. Galaviz, H. Geissel, L. Grigorenko, M. Heil, D. H.H. Hoffmann, J. Hoffmann, H. Johansson, B. Jonson, C. Karagiannis, O. Kiselev, J. V. Kratz, R. Kulesa, N. Kurz, C. Langer, M. Lantz, K. Larsson, T. Le Bleis, R. Lemmon, A. Lindahl, Yu. A. Litvinov, K. Mahata, C. Müntz, T. Nilsson, C. Nociforo, G. Nyman, W. Ott, V. Panin, Yu. Parfenova, S. Paschalis, A. Perea, R. Plag, R. Reifarth, A. Richter, C. Rodríguez Tajés, D. Rossi, G. Schrieder, N. Shulgina, H. Simon, J. Stroth, K. Sümmerer, J. Taylor, O. Tengblad, E. Tengborn, F. Wamers, H. Weick, C. Wimmer and M. Zhukov.
Coulomb breakup of ^{17}Ne from the view point of nuclear astrophysics.
Proceedings of Science, online 2012.
119. B.S. Nara Singh, S.K.L. Sjuve, B. Davids, M. Hass, P. Adsley, L. Buchmann, M. Carmona-Gallardo, J. Fallis, S. P. Fox, B. Fulton, N. Galinski, U. Hager, D. A. Hutcheon, A.M. Laird, L. Martin, D. Ottewell, S. Reeve, C. Ruiz, G. Ruprecht, A. Shotter and O. Tengblad.
Cross section measurements of the $^3\text{He}(\alpha, \gamma)^7\text{Be}$ reaction using DRAGON at TRIUMF.
Proceedings of the fifth Conference of the Nuclear Physics in Astrophysics (2011).
Journal of Physics: Conference Series **337**, 012057 (2012)
120. V. Scuderi, A.D. 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. Pérez-Bernal, R. Raabe, G. Randisi, F. Rizzo, D. Santonocito, G. Scalia, O. Tengblad, D. Torresi, A.M. Vidal, M. Zadro.
Elastic scattering and direct reactions of the In halo ^{11}Be nucleus on ^{64}Zn near the barrier.
Proceedings of the Rutherford Centennial Conference on Nuclear Physics (2011).
Journal of Physics: Conference Series **381**, 012050 (2012)

6.1.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS

121. T. Bartels-Rausch, V. Bergeron, JHE. Cartwright, R. Escribano, J.L. Finney, H. Grothe, P.J. Gutierrez, J. Haapala, W.F. Kuhs, JBC. Pettersson, SD. Price, CI. Sainz-Diaz, DJ. Stokes, G. Strazzulla, ES. Thomson, H. Trinks, N. Uras-Aytemiz.
Ice structures, patterns, and processes: A view across the icefields.
Reviews of Modern Physics **84**, p.885 (2012).
122. E. Carrasco, V.J. Herrero and I. Tanarro.
Time resolved diagnostics and kinetic modeling of the ignition transient of a $\text{H}_2 + 10\% \text{N}_2$ square wave modulated hollow cathode discharge.
Journal of Physics D: Applied Physics **45**, 305201(2012).
123. E. Carrasco, M. Jiménez-Redondo, V.J. Herrero and I. Tanarro.
Chemistry in Low Pressure Cold Plasmas: Ions of Astrophysical Interest.
Plasma Physics and Controlled Fusion **54**, 124019 (2012).

124. E. Casanova-González, A. García-Bucio, J.L. Ruvalcaba-Sil, V. Santos-Vasquez, B. Esquivel, T. Falcón, E. Arroyo, S. Zetina, M.L. Roldán and C. Domingo.
Surface-enhanced Raman spectroscopy spectra of Mexican dyestuffs.
Journal of Raman Spectroscopy **43**, p.1551 (2012).
125. M. Culebras, A. Madronero, A. Cantarero, J. M. Amo, C. Domingo and A. Lopez.
Confident methods for the evaluation of the hydrogen content in nanoporous carbon microfibers.
Nanoscale Research Letters **7**, 588 (2012).
126. P. G. Jambrina, J. M. Alvariño, D. Gerlich, M. Hankel, V. J. Herrero, V. Saez-Rabanos and F. J. Aoiz.
Dynamics of the $D^+ + H_2$ and $H^+ + D_2$ reactions: a detailed comparison between theory and experiment.
Physical Chemistry Chemical Physics **14**, 3346 (2012).
127. P. G. Jambrina, E. García, V. J. Herrero, V. Sáez-Rábanos and F. J. Aoiz.
Dynamics of the reactions of muonium and deuterium atoms with vibrationally excited hydrogen molecules: tunneling and vibrational adiabaticity.
Physical Chemistry Chemical Physics. **14**, 14596 (2012).
128. M. Lopez-Arias, M. Oujja, M. Sanz, RA. Ganeev, GS. Boltaev, NK. Satlikov, RI. Tugushev, T. Usmanov and M. Castillejo.
Low-order harmonic generation in metal ablation plasmas in nanosecond and picosecond laser regimes.
Journal of Applied Physics **111**, 043111 (2012).
129. M. Lopez-Arias, M. Oujja, M. Sanz, R. de Nalda, RA. Ganeev and M. Castillejo.
Generation of low-order harmonics in laser ablation plasmas.
Molecular Physics **110**, p.1651 (2012).
130. M. Louvriot, V. Boudon, L. Manceron, P. Roy, D. Bermejo and R.Z. Martínez.
High-Resolution Spectroscopy and Structure of Osmium Tetroxide. A Benchmark Study on $192OsO_4$.
Inorganic Chemistry **51**, 10356 (2012).
131. M. Louvriot, V. Boudon, D. Bermejo, R. Z. Martínez and L. Manceron
"High-resolution stimulated Raman spectroscopy and analysis of the ν_1 band of osmium tetroxide".
Journal of Raman Spectroscopy, online 11 Aug 2012
132. B. Maté, V.J. Herrero, Y. Rodríguez-Lazcano. D. Fernández-Torre, M.A. Moreno, P.C. Gómez and R. Escribano.
Cyanate ion in compact amorphous water ice.
The Astrophysical Journal **759**, 90 (2012).
133. B. Maté, Y. Rodríguez-Lazcano and V. J. Herrero.
Morphology and crystallization kinetics of compact (HGW) and porous (ASW) amorphous water ice.
Physical Chemistry Chemical Physics **14**, 10595 (2012)
134. C. Morant, T. Campo, F. Márquez, C. Domingo, J.M. Sanz and E. Elizalde.
Mo-Co catalyst nanoparticles: Comparative study between TiN and Si surfaces for single-walled carbon nanotube growth.
Thin Solid Films **520**, p.5232 (2012).
135. N. H. Ngo, H. Tran, R. R. Gamache, D. Bermejo and J.L. Domenech.
Influence of velocity effects on the shape of N_2 (and air) broadened H_2O lines revisited with classical molecular dynamics simulation.
Journal of Chemical Physics **137**, 064302 (2012).
136. Juan Ortigoso.
Quantum adiabatic theorem in light of the Marzlin-Sanders inconsistency.
Physical Review A **86**, 032121 (2012).
137. Juan Ortigoso.
Mechanism of molecular orientation by single-cycle pulses.

Journal of Chemical Physics **137**, 044303 (2012).

138. Y. Rodríguez-Lazcano, V. Correcher and J. García-Guinea.
Luminescence emission of natural NaCl.
Radiation Physics and Chemistry **81**, p.126 (2012)
139. Y. Rodríguez-Lazcano, B. Maté, O. Gálvez, V.J. Herrero, I. Tanarro and R. Escribano.
Solid L-a-alanine: Spectroscopic properties and theoretical calculations.
Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer **113**, p.1266 (2012).
140. M. Sánchez-Castellanos, R. Lemus, M. Carvajal, F. Pérez-Bernal and J. M. Fernández.
A study of the Raman spectrum of CO₂ using an algebraic approach.
Chemical Physics Letters **554**, p.208 (2012).

PUBLICACIONES CONJUNTAS CON EL DPTO. DE ENVYMED / PUBLICATIONS IN COMMON WITH THE NUCLEAR, VIBRATIONAL AND DESORDERED MEDIA SPECTROSCOPY DEPARTMENT

- M.L. Roldán, S. Sánchez-Cortés, J.V. García-Ramos and C. Domingo.
Cucurbit[8]uril-stabilized charge transfer complexes with diquat driven by pH: A SERS study.
Physical Chemistry Chemical Physics **14**, p.4935 (2012).
- M. Hernandez, G. Recio, R. Martín-Palma, J.V. García-Ramos, C. Domingo and P. Sevilla.
Surface enhanced fluorescence of anti-tumoral drug emodin adsorbed on silver nanoparticles and loaded on porous silicon.
Nanoscale Research Letters **7**, 364 (2012).
- Z. Jurasekova, C. Domingo, J.V. García-Ramos and S. Sánchez-Cortés.
Adsorption and catalysis of flavonoid quercetin on different plasmonic metal nanoparticles monitored by SERS.
Journal of Raman Spectroscopy **43**, p.1913 (2012).
- E. Rebollar, M. Sanz, S. Pérez, M. Hernández, I. Martín-Fabiani, D.R. Rueda, T.A. Ezquerro, C. Domingo and M. Castillejo.
Gold coatings on polymer Laser Induced Periodic Surface Structures: Assessment as substrates for Surface-Enhanced Raman Scattering.
Physical Chemistry Chemical Physics **14**, p.15699 (2012).

PROCEEDINGS ISI / ISI PROCEEDINGS

141. T. G. Elizarova, A. A. Gogolin and S. Montero.
Para-Hydrogen Narrow Filament Evaporation at Low Temperature.
Proceedings of the 28th International Symposium on Rarefied Gas Dynamics 2012.
AIP Conference Proceedings **1501**, p.1236 (2012)
142. J. M. Fernández, M. Kühnel, G. Tejada, A. Kalinin, R. E. Grisenti and S. Montero.
Experiments on Microjets of Undercooled Liquid Hydrogen.
Proceedings of the 28th International Symposium on Rarefied Gas Dynamics 2012.
AIP Conference Proceedings **1501**, p.1296 (2012)
143. Ramos, G. Tejada, J. M. Fernández and S. Montero.
Cluster Growth in Supersonic Jets of CO₂ through a Slit Nozzle.
Proceedings of the 28th International Symposium on Rarefied Gas Dynamics 2012.
AIP Conference Proceedings **1501**, p.1383 (2012)
144. P. A. Skovorodko, A. Ramos, G. Tejada, J. M. Fernández and S. Montero.
Experimental and Numerical Study of Supersonic Jets of N₂, H₂, and N₂ + H₂ Mixtures.
Proceedings of the 28th International Symposium on Rarefied Gas Dynamics 2012.
AIP Conference Proceedings **1501**, p.1228 (2012)

145. G. Tejeda, J. M. Fernández and S. Montero.
Diagnostics of H₂O and H₂O+He Supersonic Jets by Raman Spectroscopy.
Proceedings of the 28th International Symposium on Rarefied Gas Dynamics 2012.
AIP Conference Proceedings **1501**, p.1305 (2012)

6.1.4 **DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS**

146. E. Androulaki, N. Vergadou, J. Ramos and I.G. Economou
Structure, thermodynamic and transport properties of imidazolium-based bis(trifluoromethylimidazolium tetracyanoborate ionic liquids from molecular dynamics simulations".
Molecular Physics **110**, p.1139 (2012).
147. F. Ania, F. J. Baltá Calleja, A. Flores, G.H. Michler, S. Scholtyssek, D. Khariwala, A. Hiltner, E. Baer, L. Rong and B.S. Hsiao.
Nanostructure and crystallization phenomena in multilayered films of alternating i-PP and PA6 semicrystalline polymers.
European Polymer Journal **48**, p.86 (2012).
148. N. Bitinis, A. Sanz, A. Nogales, R. Verdejo, M.A. Lopez-Manchado and T.A. Ezquerra.
Deformation Mechanisms in Poly(lactic Acid)/Natural Rubber/Organoclay Bionanocomposites as Revealed by Synchrotron X-ray Scattering
Soft Matter **8**, p.8990 (2012).
149. S. Bouhelal, M.E. Cagiao, M. L. Di Lorenzo, F. Zouai, S. Khellaf, H. Tabet, D. Benachour and F.J. Baltá Calleja.
Study of rheological and mechanical properties of ternary blends of (iPP)/(LDPE)/(EPDM).
Journal of Polymer Engineering **32**, p.143 (2012).
150. M. E. Cagiao, F. J. Baltá Calleja, F. Spieckermann, S. Scholtyssek, M. F. Mina and M. A. H. Bhuiyan
X-ray diffraction study of iPP/clay and iPP/TiO₂ composites relating to micromechanical properties
Journal of Applied Polymer Science **124**, p.3147 (2012).
151. J. Cardoso, A. Romo-Urbe and A. Flores.
Nanostructure and Viscoelasticity of Layered Silicate Nanocomposite–Electrolyte Supports.
Journal of Applied Polymer Science **123**, p.944 (2012).
152. V. Cruz, J. Ramos and J. Martínez-Salazar.
Assessment of the Intrinsic Conformational Preferences of Dipeptide Amino Acids in Aqueous Solution by Combined Umbrella Sampling/MBAR Statistics. A Comparison with Experimental Results.
The Journal of Physical Chemistry B **116**, p.469 (2012).
153. A.M. Díez-Pascual, M.A. Gómez-Fatou, F. Ania and A. Flores.
Nanoindentation assessment of the interphase in hierarchical PEEK/GF/CNT laminates.
Journal of Physical Chemistry C **116**, p.24193 (2012).
154. Martín-Fabiani, E. Rebollar, S. Pérez, D.R. Rueda, M.C. García-Gutiérrez, A. Szymczyk, Z. Roslaniec, M. Castillejo and T.A. Ezquerra.
Laser Induced Periodic Surface Structures Nanofabricated on Poly(trimethylene terephthalate) Spin-coated Films.
Langmuir **28**, p.7938 (2012).
155. Flores, F. Ania, C. Arribas, A. Ochoa, S. Scholtyssek, F. J. Baltá Calleja and E. Baer.
Confined crystallization of nanolayered poly(ethylene terephthalate) using X-ray diffraction methods.
Polymer **53**, p.3986 (2012).
156. L. González-García, J. Parra-Barranco, J.R. Sánchez-Valencia, A. Barranco, A. Borrás, A.R. González-Elipe, M.C. García-Gutiérrez, J.J. Hernández, D.R. Rueda and T.A. Ezquerra.
Correlation lengths, porosity and water adsorption in TiO₂ thin films prepared by glancing angle deposition.

- Nanotechnology **23**, 205701 (2012).
157. C. Gualandi, M. Soccio, E. Saino, M.L. Focarete, N. Lotti, A. Munari, L. Moronig and L. Visai.
Easily synthesized novel biodegradable copolyesters with adjustable properties for biomedical applications.
Soft Matter **8**, p.5466 (2012).
158. M. Hernandez, M.D. Bernal, R. Verdejo T.A. Ezquerra and M.A. Lopez-Manchado.
Overall performance of natural rubber/graphene nanocomposites.
Composite Science and Technology **73**, 40 (2012).
159. J.J. Hernández, M.C. García-Gutierrez, D.R. Rueda, T.A. Ezquerra and R.J. Davies.
Influence of Single Wall Carbon Nanotubes and Thermal Treatment on the Morphology of Polymer Thin Films.
Composites Science and Technology **72**, p.421 (2012).
160. M. Hernández, T.A. Ezquerra, R. Verdejo and M. López-Manchado.
Role of Vulcanizing Additives on the Segmental Dynamics of Natural Rubber.
Macromolecules **45**, p.1070 (2012).
161. S. Khellaf, F. Khoffi, H. Tabet, A. Lallam, S. Bouhelal, M. E. Cagiao, D. Benachour and F. J. Baltá Calleja.
Study of iPP crosslinking by means of dynamic and steady rheology measurements.
Journal of Applied Polymer Science **124**, p.3184 (2012).
162. T. Koller, J. Ramos, N.M. Garrido, A.P. Fröba and I.G. Economou.
Development of a united-atom force field for 1-ethyl-3-methylimidazolium tetracyanoborate ionic liquid.
Molecular Physics **110**, p.1115 (2012).
163. Lorca, J. Martín-Caro, R. Núñez-Ramírez and J. Martínez-Salazar
Merging on-demand HPC resources from Amazon EC2 with the grid: A case study of a XMIPP application.
Computing and Informatics **31**, p.17 (2012).
164. S. Martínez, V.L. Cruz, J. Ramos and J. Martínez-Salazar.
Polymerization activity prediction of zirconocene single-site catalysts using 3D quantitative structure-activity relationship modeling.
Organometallics **31**, p.1673 (2012).
165. D.E. Martinez-Tong, M. Soccio, A. Sanz, T.A. Ezquerra, N. Lotti, A. Munari A and A. Nogales.
Towards homogeneous dynamics in incompatible blends by selective transesterification.
Soft Matter **8**, p.2723 (2012).
166. K. Moorthi, K. Kamio, J. Ramos and D.N. Theodorou.
Monte Carlo simulation of short chain branched polyolefins: Structure and properties.
Macromolecules **45**, p.8453 (2012).
167. R. Núñez-Ramírez, M.J. Sánchez-Barrena, I. Villalta, J.F. Vega, J.M. Pardo, F.J. Quintero, J. Martínez-Salazar and A. Albert
Structural insights on the plant Salt-Overly-Sensitive 1 (SOS1) Na⁺/H⁺ antiporter.
Journal of Molecular Biology **424**, p.283 (2012).
168. S. Paszkiewicz, A. Szymczyk, Z. Spitalsky, M. Soccio, J. Mosnacek, T.A. Ezquerra and Z. Roslaniec.
Electrical conductivity of poly(ethylene terephthalate)/expanded graphite nanocomposites prepared by in situ polymerization.
Journal of Polymer Science, Part B: Polymer Physics **50**, p.1645 (2012).
169. J. Ramos, S. Martínez, V.L. Cruz and J. Martínez-Salazar.
A Curtin-Hammett mechanism for the copolymerization of ethylene and methyl acrylate monomer using a PymNox nickel catalyst as revealed by DFT computational studies
Journal of Molecular Modeling **18**, p.515 (2012).

170. J. Ramos, J.F Vega and J. Martínez-Salazar.
Assessment of entanglement features and dynamics from atomistic simulations and experiments in linear and short chain branched polyolefins.
Soft Matter **8**, p.6256 (2012).
171. E. Rebollar, J.R. Vázquez de Aldana, J.A. Pérez-Hernández, T.A. Ezquerra, P. Moreno and M. Castillejo.
Ultraviolet and infrared femtosecond laser induced periodic surface structures on thin polymer films.
Applied Physics Letters **100**, 041106 (2012).
172. A. Romo-Uribe, O. Flores, B. Campillo, A. Flores and M. Jaffé.
Influence of microfillers on molecular alignment and tensile stress fracture in thermotropic liquid crystalline polymer.
Emerging Materials Research **1** (3), p.146 (2012).
173. D.R. Rueda, I. Martín-Fabiani, M. Soccio, N. Alayo, F. Pérez-Murano, E. Rebollar, M.C. García-Gutiérrez, M. Castillejo and T.A. Ezquerra.
Grazing-incidence small-angle X-ray scattering of soft and hard nanofabricated gratings.
Journal of Applied Crystallography **45**, p.1038 (2012).
174. S. Sanmartín, J. Ramos and J. Martínez-Salazar
Following the crystallization process of polyethylene single chain using molecular dynamics: The role of the lateral chain defects.
Macromolecular Symposia **312**, p. 97 (2012).
175. M. Soccio, N. Lotti, M. Gazzano, M. Govoni, E. Giordano and A. Munari.
Molecular architecture and solid-state properties of novel biocompatible PBS-based copolyesters containing sulphur atoms.
Reactive and Functional Polymers **72**, p.856 (2012).
176. M. Soccio, A. Nogales, T.A. Ezquerra, N. Lotti and A. Munari.
The effect of copolymerization in the dynamics of poly(trimethylene terephthalate).
Macromolecules **45**, p.180 (2012).
177. J.F. Vega, J. Otegui, J. Ramos and J. Martínez-Salazar.
Effect of molecular weight distribution on Newtonian viscosity of linear polyethylene
Rheologica Acta **51**, p.81 (2012).

PROCEEDING ISI / ISI PROCEEDINGS

178. L. Albañil-Sánchez, A. Romo-Uribe, A. Flores and R Cruz-Silva.
Electrospun Nylon-graphene Nanocomposites. Synthesis and Microstructure.
MRS Symposium Proceedings **1453**, 1110 (2012).
179. S. M. Castillejo, T.A. Ezquerra, M. Martín, M. Oujja, S. Pérez and E. Rebollar.
Laser Nanostructuring of Polymers: Ripples and Applications
Book Editor(s): C. Phipps, Conference: International Symposium on High Power Laser Ablation (HPLA), Santa Fe, NM 30-May03, 2012 International Symposium on High Power Laser Ablation
Book Series: AIP Conference Proceedings **1464**, p.372 (2012).
180. M. Domínguez-Díaz, A. Romo-Uribe, A. Flores and R. Cruz-Silva.
Morphology-induced Hydrophobic Behavior of Electrospun Polyhydroxyalkanoate Membranes.
MRS Symposium Proceedings **1466**, 1256 (2012).
181. M. Hernández, T.A. Ezquerra and M.A. Lopez-Manchado.
Effects of Orientation on the Segmental Dynamics of Natural Rubber
Book Editor(s): Boudenne, A., Conference on Multiphase Polymers and Polymer Composites Systems: Macro to Nano Scales Location: Paris, France, Jun 07-10, 2011.
Polymer Composite Materials: From Macro, Micro to Nanoscale, Book Series: Materials Science Forum **714**, p.57 (2012).

182. H. Vargas-Villagrán, E. Terán-Salgado, M. Domínguez-Díaz, O. Flores, B. Campillo, A. Flores and A. Romo-Uribe.
Non-woven membranes electrospun from polylactic acid incorporating silver nanoparticles as biocide
MRS Symposium Proceedings **1376**, 285 (2012).

6.2 PUBLICACIONES EN REVISTAS NO JCR/ISI / NON JCR-ISI PUBLICATIONS

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

1. M. Albers... P. Sarriguren.
Erratum: Evidence for a smooth onset of deformation in the neutron-rich Kr isotopes.
Physical Review Letters **109**, 209904 (2012).

6.2.2 DPTO. DE ESPECTROSCOPIA NUCLEAR, VIBRACIONAL Y MATERIA DESORDENADA / NUCLEAR, VIBRATIONAL AND DISORDERED MEDIA SPECTROSCOPY

2. D. Cortina-Gil, H. Álvarez-Pol, T. Aumann, V. Avdeichikov, M. Bendel, J. Benlliure, D. Bertini, A. Bezbakh, T. Bloch, M. Böhmer, M.J.G. Borge, J.A. Briz, P. Cabanelas, E. Casarejos, M. Carmona Gallardo, J. Cederkäll, L. Chulkov, M. Dierigl, D. Di Julio, I. Durán, E. Fiori, A. Fomichev, D. Galaviz, M. Gascón, R. Gernhäuser, J. Gerl, P. Golubev, M. Golovkov, D. González, A. Gorshkov, A. Hein3, M. Heil, W. Henning, G. Ickert, A. Ignatov, B. Jakobsson, H.T. Johansson, Th. Kröll, R. Krücken, S. Krupko, F. Kurz, T. Le Bleis, B. Löher, N. Montes, E. Nacher, T. Nilsson, C. Parrilla, A. Perea, N. Pietralla, B. Pietras, R. Reifarth, J. Sánchez del Río, D. Savran, S. Sidorchuk, H. Simon, L. Schnorrenberger, O. Tengblad, P. Teubig, R. Thies, J.A. Vilán, M. von Schmid, M. Winkel, S. Winkler, F. Wamers, and P. Yañez.
Technical design of the CALIFA/R3B Barrel detector.
GSI Scientific Report 2011 - PHN-NUSTAR-NR-05, p.177 (2012).

6.2.4 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

3. A Romo-Uribe, O Flores, B Campillo, A Flores, M Jaffe
Influence of microfillers on molecular alignment and tensile stress fracture in thermotropic liquid crystalline polymer.
Emerging Materials Research **1**, p.146 (2012).

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, A.N. Antonov, P. Sarriguren and E. Moya de Guerra.
Nuclear Matter Properties of Deformed Neutron-rich nuclei.
Proceedings of the 31st International Workshop on Nuclear Theory, Vol. **31**, p.125 (2012)
Heron Press, Sofia, Bulgaria. (ISSN: 1313-2822).
2. G. A. Mena Marugán, J. F. Barbero G., L. J Garay, E.J.S. Villaseñor and J. Olmedo (Editors).
Loops 11: Non-perturbative / Background Independent Quantum Gravity.
Journal of Physics Conference Series **360** (2012).

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

3. J.J. Camacho, L. Díaz, J.P. Cid and J.M.L. Poyato.
Spectroscopic analysis and temporal evolution of laser-induced plasma in different samples.
Serie: Horizons in World Physics (ebook), V.277.
Albert Reimer (Eds.), Nova Science Publishers, Inc. (New York), Chapter 1, 63
ISBN: 978-1-62100-658-9.
4. M. Criado, S. Martínez-Ramírez, S. Fajardo and J. M. Bastidas.
Caracterización de los productos de corrosión del acero embebido en morteros de ceniza volante mediante espectroscopía Raman.
Proceedings of the XII Congreso Nacional De Materiales.
ISBN: 978-84-695-3316-1.
5. L. Fernández-Carrasco, D. Torrens-Martín, L.M. Morales, S. Martínez-Ramírez.
Infrared Spectroscopy in the Analysis of Building and Construction Materials.
Infrared Spectroscopy-Materials Science, Engineering and Technology/ Book 1, Prof. Theophanides Theophile (ed.), InTech (publisher), pp. 369 (2012)
ISBN: 978-953-51-0537-4.
6. F. Sáez del Bosque, S. Martínez-Ramírez and M.T. Blanco-Varela.
Influencia de la relación agua/sólido en la hidratación del silicato tricálcico.
Proceedings of the XII Congreso Nacional de Materiales.
ISBN: 978-84-695-3316-1.
7. P. Sevilla, G. Lajos, R. de Llanos, D. Jancura, P. Miskovsky, S. Sánchez-Cortés and J.V. García-Ramos.
Surface-Enhanced Fluorescence and Raman (SEF and SERS) of Anthraquinone Anti tumoral Drugs and their Complexes with Biomolecules on Ag Nanoparticles.
Serie: Advances in Biomedical Spectroscopy (ebook), V.5: Applications of Raman Spectroscopy to Biology.
From Basic Studies to Disease Diagnosis (Ghomi M, Ed.), IOS Press (Amsterdam) pp. 31 (2012)
ISBN 978-1-60750-999-8
8. A. Toledano, M.I. Álvarez, P. Carmona, A. Toledano-Díaz, C.I. Fernández-Verdecia.
Alzheimer Pathology in Non-Human Primates and its Pathophysiological Implications.
Serie: Primates, Classification, Evolution and Behavior.
E.F. Hughes and M.E. (Eds.), Hill Nova Science Publishers, New York, pp. 71 (2012)
ISBN: 978-1-62081-498-7

6.3.4 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

9. G.H. Micher and F.J. Baltá Calleja
Nano- and Micromechanics of Polymers: Structure modification and improvement of Properties
ISBN: 978-1-569-90460-2. Carl Hanser Verlag, München, pp- 1 (2012)

6.4 TESIS DOCTORALES / Ph. D. THESES

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

Title: Inflación e Inhomogeneidades en Cosmología Cuántica de Lazos.

University: Facultad de Ciencias Físicas, Universidad Complutense de Madrid.

Date: 10th of July 2012.

Mark: Sobresaliente "cum laude".

Candidate: Javier Antonio Olmedo Nieto.

Supervisor: **Guillermo Antonio Mena Marugán.**

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

Title: Estudio de la dispersión de ^9Li y ^{11}Li sobre un blanco de ^{208}Pb a energías en torno a la barrera Coulombiana.

University: Facultad de C.C. Físicas. Universidad Complutense de Madrid.

Date: 21st of December 2012.

Mark: Sobresaliente “cum laude”.

Candidate: **Mario Alberto Cubero Campos.**

Supervisor: **M^a José García Borge.**

Title: Adsorción y detección ultrasensible de sustancias de dopaje deportivo sobre nanopartículas plasmónicas.

University: Facultad de C.C. Químicas. Universidad Complutense de Madrid.

Date: 18th of July 2012.

Mark: Sobresaliente “cum laude”.

Candidate: **Irene Izquierdo Lorenzo.**

Supervisor: **Santiago Sánchez Cortés.**

Title: Detección y caracterización de quinacridonas de altas prestaciones mediante espectroscopias moleculares (Raman y Fluorescencia) intensificadas por nanopartículas metálicas.

University: Facultad de Ciencias. Universidad de Valladolid.

Date: 9th of May 2012.

Mark: Sobresaliente “cum laude”.

Candidate: **Elena del Puerto Nevado.**

Supervisor: **Santiago Sánchez Cortés and Concepción Domingo Maroto.**

(Together with FM)

Title: Fotónica de plasmones superficiales en nanoestructuras metálicas.

University: Facultad de Ciencias Físicas, Universidad Complutense de Madrid.

Date: 20th of January 2012.

Mark: Sobresaliente “cum laude”.

Candidate: **Rogelio Rodríguez Oliveros.**

Supervisor: **José A. Sánchez Gil.**

Title: Valorización de residuos de estaciones de tratamiento de agua potable y residual en la industria del cemento.

University: Facultad de Ciencias, Universidad Autónoma de Madrid.

Date: 7th of February 2012.

Mark: Sobresaliente “cum laude”.

Candidate: **Nuria Husillos Rodriguez.**

Supervisor: **María Teresa Blanco Varela and Sagrario Martínez Ramírez.**

Title: Modificaciones nanoestructurales en pastas de cemento.

University: Facultad de Ciencias, Universidad Autónoma de Madrid.

Date: 17th of July 2012.

Mark: Sobresaliente “cum laude”.

Candidate: **Isabel F. Sáez del Bosque.**

Supervisor: **María Teresa Blanco Varela and Sagrario Martínez Ramírez.**

6.4.4 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

Title: Procesos de crecimiento de nanoestructuras inducidos por flujo viscoelástico.

University: Universidad Complutense de Madrid.

Date: 20th of January 2012.

Mark: Sobresaliente “cum laude”.

Candidate: **Nuria Robledo Álvaro.**

Supervisors: **Javier Martínez de Salazar Bascuñana and Juan Francisco Vega Borrego.**

Title: **Estudio de La dinámica molecular de nanocompuestos de caucho natural.**

University: Universidad Complutense de Madrid.

Date: 21st of June 2012.

Mark: Apto “cum laude”.

Candidate: **Marianela Hernández Santana.**

Supervisor: **Miguel Angel López Manchado and Tiberio 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: **Unitariedad y unicidad de la teoría cuántica de campos en cosmología. Transformaciones canónicas dependientes del tiempo y de los modos (Trabajo Académicamente Dirigido).**

University: Universidad Complutense de Madrid.

Date: September 2012.

Mark: Sobresaliente.

Candidate: **Lucía Fonseca de la Bella.**

Supervisor: **Guillermo A. Mena Marugán and Luis J. Garay.**

Title: **Smoking Guns of a Bounce in Modified Theories of Gravity through the Spectrum of the Gravitational Waves.**

University: Instituto Superior Técnico Lisboa, Lisboa, Portugal.

Date: October 2012.

Mark: 20/20.

Candidate: **João Morais.**

Supervisor: **Mariam Bouhmadi López.**

Title: **Análisis de una inconsistencia en la interacción entre sistemas clásicos y cuánticos (Máster).**

University: Universidad de Granada.

Date: 12th July 2012.

Mark: Sobresaliente.

Candidate: **Raúl Carballo-Rubio.**

Supervisor: **Carlos Barceló and Luis J. Garay.**

Title: **Hybrid Classical-Quantum Formulations Asks for Hybrid Notions (Máster).**

University: Universidad Complutense de Madrid.

Date: July 2012.

Mark: Sobresaliente.

Candidate: **Ricardo Gómez-Escalante.**

Supervisor: **Carlos Barceló and Luis J. Garay.**

Title: **Efectos de la masa de neutrinos activos y estériles en espectros beta nucleares.**

University: Facultad de Ciencias Físicas, Universidad Complutense de Madrid.

Date: 4th of July 2012.

Mark: Sobresaliente.

Candidate: **Juan Manuel Boillos Betete.**

Supervisor: **Óscar Moreno Díaz and Elvira Moya de Guerra.**

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

Title: **Fabricación de nanoestructuras con propiedades plasmónicas: aplicaciones es espectroscopía Raman intensificada por superficie para la caracterización de colorantes marcadores de Alzheimer.**

University: Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Autónoma de Madrid.

Date: 10th of October 2012.

Mark: Sobresaliente.

Candidate: **Adianez García Leis.**

Supervisor: **Santiago Sánchez Cortés.**

6.5.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS

Title: **Distribuciones de energía de neutros e iones en descargas de cátodo hueco de H₂/D₂.** End of Master Work in the Master in Fundamental Physics.

University: Universidad Complutense de Madrid.

Date: 26th of September 2012.

Mark: Sobresaliente.

Candidate: **Miguel Jiménez Redondo.**

Supervisor: **Isabel Tanarro Onrubia.**

6.5.4 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

Title: **Dinámica Homogénea en Mezclas de Polímeros Incompatibles Mediante Transesterificación.**

University: Universidad Complutense de Madrid

Date: 5th of July 2012.

Mark: Matricula de Honor.

Candidate: **Daniel Martínez Tong.**

Supervisor: **Aurora Nogales Ruiz.**

Title: **Estudio del crecimiento cristalino en modelos nanoestructurados mediante simulación molecular.**

University: Universidad Simón Bolívar (Venezuela).

Date: January 2012.

Mark: Excepcionalmente Bueno.

Candidate: **Karina Jerónimo Martínez.**

Supervisors: **Javier Martínez de Salazar Bascuñana and Víctor Cruz Cañas.**

Title: **Efecto de la arquitectura molecular en la morfología de los monocristales de polietilenos.**

University: Universidad Simón Bolívar (Venezuela).

Date: March 2012.

Mark: Excepcionalmente Bueno.

Candidate: **Nathalie Jarjour Pinto.**

Supervisors: **Javier Martínez de Salazar Bascuñana and Rafael Núñez-Ramírez.**

Title: **Propiedades viscoelásticas en el régimen lineal en estado fundido de mezclas de Poliolefinas.**

University: Universidad Simón Bolívar (Venezuela).

Date: March 2012.

Mark: Excepcionalmente Bueno.

Candidate: **Adriana Jarjour Pinto.**

Supervisors: **Javier Martínez de Salazar and Juan Francisco Vega Borrego.**

Title: **Estudio conformacional de receptores de la familia ErBb mediante Dispersión Dinámica de Luz y Microscopía Electrónica de Transmisión.**

University: Universidad Autónoma de Madrid.

Date: July 2012.

Mark: Sobresaliente.

Candidate: **Ernesto Vicente Alique.**

Supervisors: **Javier Martínez de Salazar Bascuñana and Juan Francisco Vega Borrego.**

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 2008	2008	Expected 2009	2009	Expected 2010	2010	Expected 2011	2011	Expected 2012	2012
Number of ISI publications	155	171	165	166	152	174	163	186	173	182
Number of non-ISI publications	14	46	14	29	-	28	-	18	-	12
Total stock of PhD fellowships and contracts	25	41	26	34	-	25	-	23	-	18
Stock of postdoc fellowships and contracts	16	22	18	18	-	22	-	23	-	18
Number of PhD Theses defended	6	5	7	11	7	8	7	5	8	8
“Créditos” in PhD, MSc and BSc Courses	28	46	30	43,6	33,8	41,4	34,8	63,5	35,4	57,4*

*Includes data of BSc courses.

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

JOURNAL	NUMBER OF PAPERS	IMPACT FACTOR (JCR -2011)
Reviews of Modern Physics	1	43.933
Nano Letters	1	13.198
ACS Nano	1	11.421
Nature Communications	1	7.396
Physical Review Letters	7	7.370
Journal of Nuclear Medicine	1	6.381
Astrophysical Journal	1	6.024
Journal of High Energy Physics	1	5.831
Journal of Cosmology and Astroparticle Physics	2	5.723
Macromolecules	3	5.167
Journal of Applied Crystallography	1	5.152
Monthly Notices of the Royal Astronomical Society	3	4.900
Journal of Physical Chemistry C	1	4.805
Inorganic Chemistry	1	4.601
Physical Review D	5	4.558
Soft Matter	4	4.390
Langmuir	1	4.186
New Journal of Physics	1	4.177
Journal of Molecular Biology	1	4.001
Nanotechnology	1	3.979
Organometallics	1	3.963
Applied Physics Letters	2	3.844
Analytical and Bioanalytical Chemistry	1	3.778
Journal of Physical Chemistry B	1	3.696
Physical Review B	4	3.691
Food Chemistry	3	3.655

Optics Express	3	3.587
Physical Chemistry Chemical Physics	7	3.573
Polymer	1	3.438
Journal of Chemical Physics	4	3.333
Classical and Quantum Gravity	2	3.320
Physical Review C	16	3.308
Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer	1	3.193
Composites Science and Technology	2	3.144
Journal of Raman Spectroscopy	6	3.087
Journal of Physical Chemistry A	1	2.946
Physical Review A	3	2.878
Physics in Medicine and Biology	1	2.829
Cement and Concrete Research	1	2.781
European Polymer Journal	1	2.739
Plasma Physics and Controlled Fusion	1	2.731
Nanoscale Research Letters	2	2.726
Journal of Physics D: Applied Physics	1	2.544
Reactive and Functional Polymers	1	2.479
Waste Management	1	2.428
Journal of Photochemistry & Photobiology A: Chemistry	1	2.421
Cement and Concrete Composite	1	2.421
Chemical Physics Letters	3	2.337
European Physical Journal A	2	2.190
Journal of Applied Physics	1	2.168
Spectrochimica Acta Part A	1	2.098
Rheologica Acta	1	2.027
Thin Solid Films	1	1.890
Construction and Building Materials	1	1.834
Molecular Physics	3	1.819
Journal of Molecular Modeling	1	1.797
Vibrational Spectroscopy	2	1.650
European Physical Journal: Special Topics	1	1.562
Journal of Polymer Science, Part B: Polymer Physics	1	1.531
Journal of Molecular Spectroscopy	1	1.512
Journal of Mathematical Physics	1	1.291
Journal of Applied Polymer Science	3	1.289
Radiation Physics and Chemistry	1	1.227
Nuclear Instruments & Methods in Physics Research Section A- Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment	3	1.207
Physica Scripta	1	1.204
International Journal of Modern Physics A	1	1.053
Acta Physica Polonica B	1	0.901
Advances in Theoretical and Mathematical Physics	1	0.855
Annalen der Physik	1	0.841
Spectroscopy Letter	1	0.719
Materiales de Construcción	1	0.437
Journal of Polymer Engineering	1	0.397
Computing and Informatics	1	0.239
Emerging Materials Research	1	-
Macromolecular Symposia	1	-
Nuclear Theory	1	-
Materials Science Forum	1	-

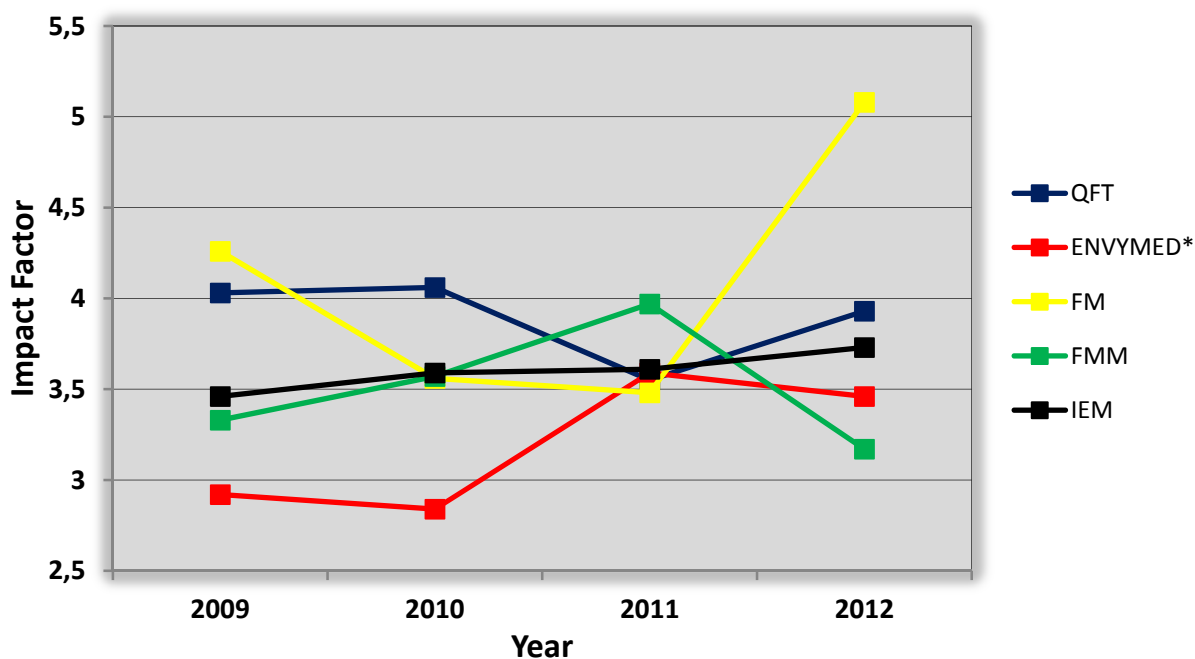
Proceedings of SPIE - The International Society for Optical Engineering	1	-
Proceedings of Science	1	-
Journal of Physics Conference Series	12	-
MRS Symposium Proceedings	3	-
AIP Conference Proceedings	18	-
TOTAL:	182	Average Impact Factor: 3,73

Number of Journals: 82

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

Department Key:

Theoretical Physics and Chemistry: _____ **QFT**
Molecular Physics: _____ **FM**
Macromolecular Physics: _____ **FMM**
Nuclear, Vibrational and
Disordered Media Spectroscopy _____ **ENVYMED**



* El Dpto.de Espectroscopia Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados (ENVYMED) fue creado en febrero del 2011, por lo que los datos comparativos de los años 2009 y 2010 han sido tomados de los antiguos departamentos que lo componen: el de Física Nuclear y Física Estadística y el de Espectroscopia Vibracional y Procesos Multifotónicos/
The ENVYMED Department was created in February of 2011. The comparative data for the years 2009 and 2010 have been taken from those of the former departments from which it was formed: The Nuclear Physics and Statistical Physics Dept. and the Vibrational Spectroscopy and Multiphotonic Processes Dept.

7.4 PERSONAL POR DEPARTAMENTOS / PERSONNEL BY DEPARTMENTS

DPTO.	Scientific Staff		“Ramón 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	1	-	3	1	1	2	4	1	-	1	16	6	22
ENVYMED	9	4	-	-	1	2	-	2	14	4	2	2	26	14	40
FM	10	3	1	-	2	3	-	-	1	2	2	1	16	9	25
FMM	7	6	1	-	1	1	1	-	5	2	2	1	17	10	27
Admon.	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	11	-	11	11
IEM	33	14	3	-	7	7	2	4	24	9	6	16	75	50	125

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: 119

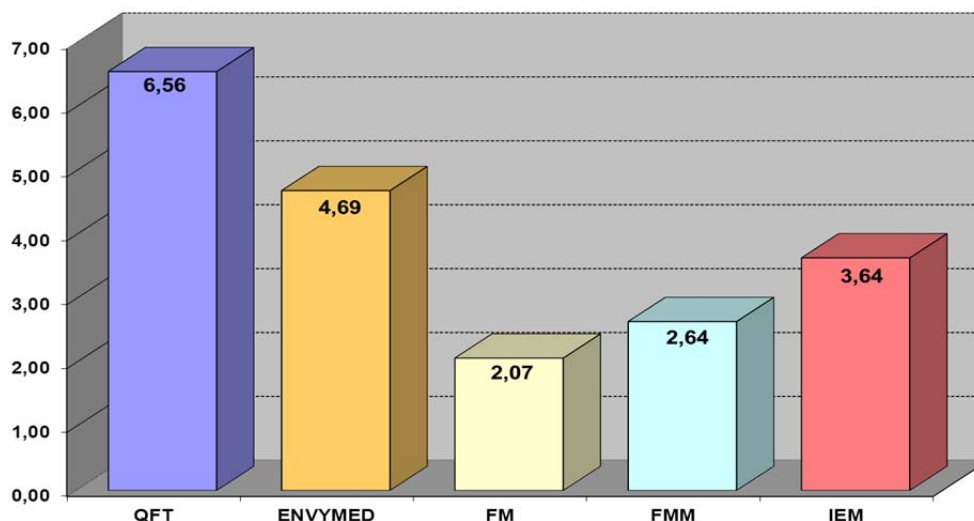
7.5 NÚMERO DE PUBLICACIONES POR DEPARTAMENTOS / NUMBER OF PAPERS BY DEPARTMENTS

	QFT	ENVYMED	FM	FMM	IEM
ISI publications	59	57(+4) ¹	25(+4) ¹	37	182
Other publications	3	7	-	2	12

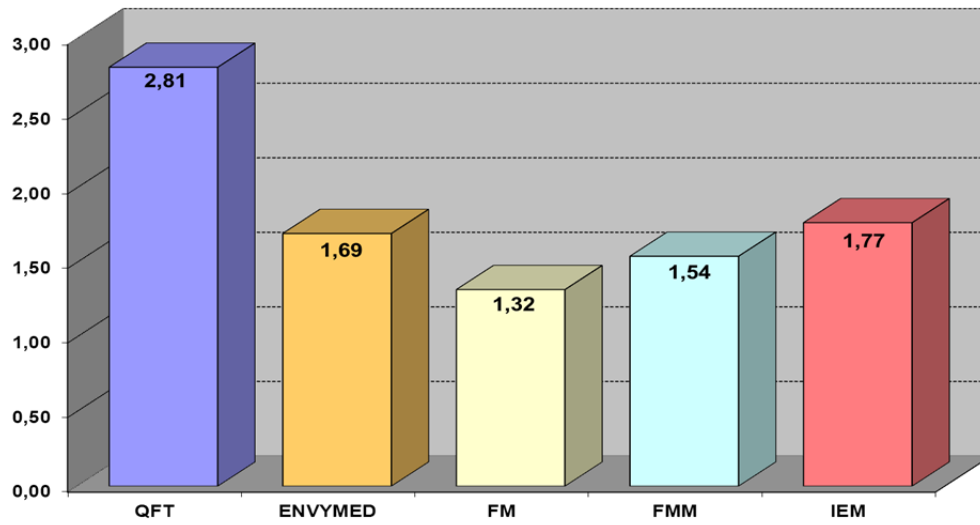
¹In parenthesis, papers shared between the ENVYMED and FM Departments.

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, 87**

ÍNDICE

INDEX

Introducción / Introduction	3
1. Estructura del Instituto / Structure of the Institute	5
Dirección / Direction	7
Junta de Instituto / Institute Board.....	7
Claustro Científico / Scientific Staff	7
Departamentos de Investigación / Research Departments	8
Dpto. de Química y Física Teóricas/ Theoretical Physics and Chemistry	8
Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados/ Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy	9
Dpto. de Física Molecular/ Molecular Physics	10
Dpto. de Física Macromolecular/ Macromolecular Physics	11
Unidad de Gestión Económica-Administrativa / Financial and Administrative Office	11
Servicios del Centro de Física Miguel Antonio Catalán / Service Units of the Center of Physics CFMAC	12
2A. Labor Investigadora	13
2A.1 Dpto. de Química y Física Teóricas	15
2A.2 Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y Medios Desordenados	21
2A.3 Dpto. de Física Molecular	36
2A.4 Dpto. de Física Macromolecular	42
2B. Research Activities.....	53
2B.1 Theoretical Physics and Chemistry Dept.	55
2B.2 Nuclear, Vibrational and Disordered Media SpectroscopyDept.	61
2B.3 Molecular Physics Dept.	74
2B.4 Macromolecular Physics Dept.....	80
3. Proyectos de Investigación / Research Grants	91
3.1 Dpto. de Química y Física Teóricas/ Theoretical Physics and Chemistry	93
3.2 Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados/ Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy.....	94
3.3 Dpto. de Física Molecular/ Molecular Physics.....	96
3.4 Dpto. de Física Macromolecular/ Macromolecular Physics.....	97
4. Cooperación Científica / Scientific Cooperation.....	101
4.1 Congresos y Reuniones Nacionales / National Congresses and Meetings	103
4.1.1 Dpto. de Química y Física Teóricas/. Theoretical Physics and Chemistry.....	103
4.1.2 Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados/ Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy	103

4.1.3	Dpto. de Física Molecular/ Molecular Physics	104
4.1.4	Dpto. de Física Macromolecular/ Macromolecular Physics.....	105
4.2	Congresos y Reuniones Internacionales / International Congresses and Meetings.....	105
4.2.1	Dpto. de Química y Física Teóricas/ Theoretical Physics and Chemistry	105
4.2.2	Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados/ Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy	108
4.2.3	Dpto. de Física Molecular/ Molecular Physics	113
4.2.4	Dpto. de Física Macromolecular/ Macromolecular Physics	115
4.3	Estancias de Investigadores en el Instituto / Visitors	117
4.3.1	Dpto. de Química y Física Teóricas/ Theoretical Physics and Chemistry	117
4.3.2	Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados/ Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy	117
4.3.3	Dpto. de Física Molecular/ Molecular Physics	118
4.3.4	Dpto. de Física Macromolecular/ Macromolecular Physics	118
4.4	Conferencias de Investigadores Invitados / Invited Conferences.....	118
4.4.1	Dpto. de Química y Física Teóricas/ Theoretical Physics and Chemistry	118
4.4.2	Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados/ Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy	120
4.4.3	Dpto. de Física Molecular/ Molecular Physics	120
4.4.4	Dpto. de Física Macromolecular/Macromolecular Physics.....	121
4.5	Visitas de Investigadores a Centros Internacionales / Visits to Foreign Institutions	121
4.5.1	Dpto. de Química y Física Teóricas/ Theoretical Physics and Chemistry	121
4.5.2	Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados/ Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy	122
4.5.3	Dpto. de Física Molecular/ Molecular Physics	123
4.5.4	Dpto. de Física Macromolecular/ Macromolecular Physics	123
5.	Labor Docente, Difusión de la Ciencia y Otras Actividades / Teaching, Outreach, and Other Activities	125
5.1	Docencia / Teaching	127
5.1.1	Dpto. de Química y Física Teóricas/ Theoretical Physics and Chemistry.....	127
5.1.2	Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados/ Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy	128
5.1.3	Dpto. de Física Molecular/ Molecular Physics	129
5.1.4	Dpto. de Física Macromolecular/Macromolecular Physics.....	130
5.2	Cursos y Conferencias / Courses and Conferences	130
5.2.1	Dpto. de Química y Física Teóricas/ Theoretical Physics and Chemistry	130
5.2.2	Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados/ Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy	131
5.2.3	Dpto. de Física Molecular/Molecular Physics	131
5.2.4	Dpto. de Física Macromolecular/ Macromolecular Physics	132

5.3	Cursos, Congresos y Seminarios Organizados por el Instituto / Courses, Congresses, and Seminars Organized by the Institute	132
5.3.1	Dpto. de Química y Física Teóricas/ Theoretical Physics and Chemistry	132
5.3.2	Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados/ Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy	133
5.3.3	Dpto. de Física Molecular/ Molecular Physics	133
5.3.4	Dpto. de Física Macromolecular/Macromolecular Physics	134
5.4	Premios y Otros Méritos /Awards	135
5.4.1	Dpto. de Química y Física Teóricas/ Theoretical Physics and Chemistry.....	135
5.4.2	Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados/ Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy	135
5.4.3	Dpto. de Física Molecular/ Molecular Physics	136
5.4.4	Dpto. de Física Macromolecular/ Macromolecular Physics	137
5.5	Actividades y Material de Divulgación / Outreach Activities and Material	137
5.5.1	Dpto. de Química y Física Teóricas/Theoretical Physics and Chemistry	137
5.5.2	Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados/ Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy	139
5.5.3	Dpto. de Física Molecular/ Molecular Physics	140
5.5.4	Dpto. de Física Macromolecular/ Macromolecular Physics.....	140
5.6	Transferencia de Tecnología / Transfer of Technology	141
5.6.1	Dpto. de Química y Física Teóricas/Theoretical Physics and Chemistry	141
5.6.2	Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados/ Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy	141
5.6.3	Dpto. de Física Molecular/ Molecular Physics	142
5.7	Unidades Asociadas y Otras Actividades / Associated Units and Other Activities	142
5.7.1.	Dpto. de Química y Física Teóricas/ Theoretical Physics and Chemistry	142
5.7.2	Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados/ Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy	142
5.7.3	Dpto. de Física Molecular/ Molecular Physics	143
5.7.4	Dpto. de Física Macromolecular/ Macromolecular Physics	143
6.	Publicaciones y Producción Científica / Publications and Scientific Production	147
6.1	Publicaciones en Revistas y Proceedings ISI / ISI Publications	149
6.1.1	Dpto. de Química y Física Teóricas/ Theoretical Physics and Chemistry	149
6.1.2	Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados/ Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy	153
6.1.3	Dpto. de Física Molecular/ Molecular Physics	159
6.1.4	Dpto. de Física Macromolecular/ Macromolecular Physics	162
6.2	Publicaciones en Revistas No JCR-ISI / Non JCR-ISI Publications	165
6.2.1	Dpto. de Química y Física Teóricas/ Theoretical Physics and Chemistry.....	165
6.2.2	Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados/ Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy	165

6.2.4	Dpto. de Física Macromolecular/ Macromolecular Physics.....	165
6.3	Libros, Monografías y Publicaciones de <i>Proceedings</i> / Books, Proceedings, and Other Publications	165
6.3.1	Dpto. de Química y Física Teóricas/ Theoretical Physics and Chemistry	165
6.3.2	Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados/ Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy	166
6.3.4	Dpto. de Macromolecular/ Macromolecular Physics	166
6.4	Tesis Doctorales / PhD Theses	166
6.4.1	Dpto. de Química y Física Teóricas/ Theoretical Physics and Chemistry	166
6.4.2	Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados/ Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy	167
6.4.4	Dpto. de Física Macromolecular/ Macromolecular Physics.....	167
6.5	Tesinas, Diploma de Estudios Avanzados y Trabajos de Máster / Graduate Diplomas and Master Theses.....	168
6.5.1	Dpto. de Química y Física Teóricas/ Theoretical Physics and Chemistry	168
6.5.2	Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados/ Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy	169
6.5.3	Dpto. de Física Molecular/ Molecular Physics	169
6.5.4	Dpto. de Física Macromolecular/Macromolecular Physics.....	169
7	Tablas y Datos / Tables and Data	171
7.1	Datos comparativos con las previsiones del Plan Estratégico / Data compared to expectations from the Strategic Plan.....	173
7.2	Resumen de publicaciones en revistas JCR-ISI / Summary of publications in JCR-ISI journals ...	173
7.3	Evolución del índice de impacto (revistas JCR-ISI) por Departamentos / Evolution of the impact factor (JCR-ISI-Journals) by Departments	175
7.4	Personal por Departamentos / Personnel by Departments.....	176
7.5	Número de publicaciones por Departamentos / Number of publications by Departments	176
7.6	Ratio de publicaciones JCR-ISI por Departamentos / Ratio of JCR-ISI publications by Departments.....	176